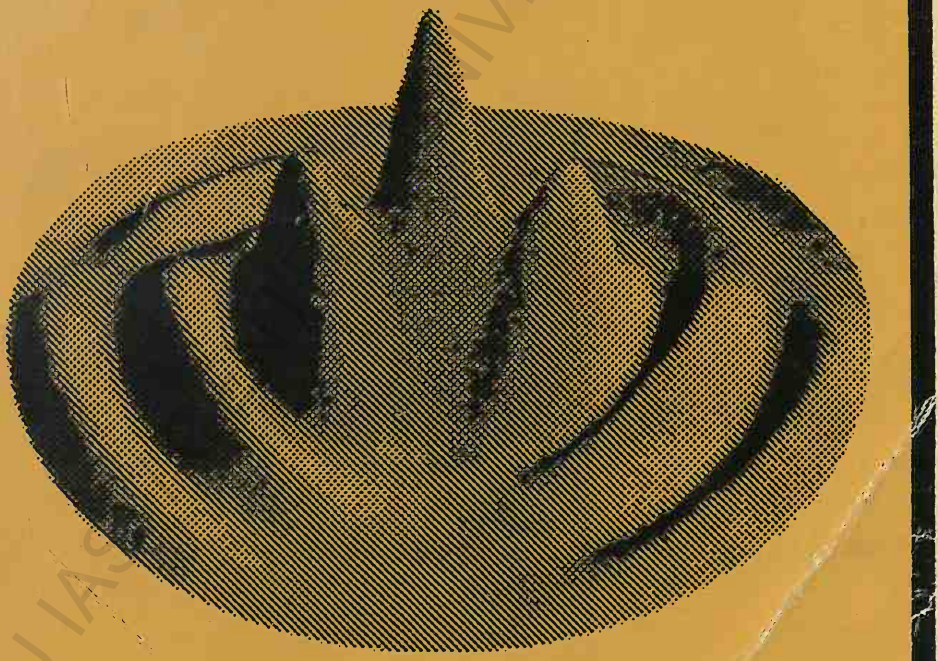
Ioan Gottlieb
Ciprian Dariescu Marina-Aura Dariescu

FUNDAMENTAREA MECANICII CUANTICE



Editura TEHNICA
CHIȘINĂU 1997

BCU IAȘI

51.242
II 11.896

Prof.univ.dr. *Ioan Gottlieb*
Lect.univ.dr. *Ciprian Dariescu*
Lect.univ.dr. *Marina-Aura Dariescu*

Universitatea *Al. I. Cuza* Iaşi

FUNDAMENTAREA

MECANICII CUANTICE

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

054189
B.C.U. - IASI

Editura *TEHNICA*
CHIŞINĂU
1997

Recenzenţi : Prof.univ. dr. Zoltán Gábos
Prof.univ. dr. Ioan Merches

41242
B.C.U. „M. Eminescu" I Şi
F I Z I C Ă
12 I 1998

Fundamentarea Mecanicii Cuantice
Ioan Gottlieb, Ciprian Dariescu, Marina-Aura Dariescu

Ch : Editura Tehnica, 1997, 568 p.

Prezentul tratat doreşte să prezinte amănunţit formarea fundamentelor mecanicii cuantice, precum şi o serie de probleme şi concepte de matematică care nu se găsesc în manualele dedicate acestei discipline.
Cartea de faţă se adresează atât fizicienilor şi matematicienilor, cât şi tuturor celor care doresc să aprofundeze acest domeniu al fizicii teoretice.

Ioan Gottlieb, Ciprian Dariescu, Marina-Aura Dariescu, 1997 ©

ISBN 5-7790-01-55-3

Prefaţă

Secolul nostru a intrat în arena fizicii cu două mari descoperiri: fizica cuantelor (Max Planck, 1900) şi teoria relativităţii restrânse (Albert Einstein, 1905). Ambele teorii se referă la domenii îndepărtate de cele pe care le contemplăm zilnic şi pe baza cărora ne formăm o concepţie (ce-i drept, naivă) despre lumea fizicii. Prima se referă la domeniul acţiunilor foarte mici (comparabile cu constanta lui Planck $h = 6{,}67 \cdot 10^{-34}$ *Js), iar a doua la domeniul vitezelor foarte mari (comparabile cu viteza luminii* $c = 3 \cdot 10^{8}$ ms^{-1}*).*

Ambele teorii sunt în flagrantă contradicţie cu conceptele fizicii secolului XIX şi ne obligă să schimbăm radical concepţiile noastre asupra multor noţiuni, care ni s-au părut înainte foarte clare, să renunţăm la un tablou intuitiv, pe care l-am acceptat cu convingere şi să ne însuşim modele matematice mult mai puţin palpabile, atunci când vrem să studiem probleme din microcosmos, sau pe cele din domeniul vitezelor mari.

In efortul continuu de înţelegere şi modelare a naturii de la constituienţii săi elementari şi până la scară cosmică, omul a fost nevoit să suprapună imaginii sale intuitive noi modele şi concepte, dezvoltând noi domenii ale fizicii.

Literatura de specialitate, care se ocupă cu probleme de Mecanică Cuantică, este deosebit de bogată, ea reflectând importanţa majoră pe care o are acest capitol al fizicii teoretice, atât datorită vastelor sale aplicaţii, cât şi pentru faptul că ea constituie un punct de plecare pentru alte discipline, cum ar fi, de exemplu, teoria cuantică a câmpurilor, teoria particulelor elementare, teoria cuantică a corpului solid, sau chimia cuantică.

BABEŞ-BOLYAI UNIVERSITY LIBRARY

Şi literatura din ţară este bogată în manuale valoroase de mecanică cuantică. Selectând cărţile mai accesibile în bibliotecile universitare, recomandăm cu căldură unele dintre ele, incluzându-le în lista noastră biliografică [69-73].

In vastitatea problemelor pe care sunt obligaţi să le trateze, autorii trebuie să omită o serie de "amănunte" subtile, dar deloc lipsite de importanţă. Prezentul tratat doreşte să umple un gol în literatura de specialitate, şi anume să prezinte amănunţit formarea fundamentelor mecanicii cuantice, precum şi o serie de probleme şi concepte de matematică - printre care amintim spaţiile Sobolev, deosebit de importante pentru tratarea riguroasă a soluţiilor ecuaţiei Schrödinger - care nu se găsesc în manualele ce se ocupă de mecanica cuantică. De asemenea, unele noţiuni sunt prezentate şi din altă perspectivă decât cea uzuală, permiţând trecerea la domenii conexe. Astfel, comutatorii ne oferă prilejul de a aborda elemente de grupuri şi algebre Lie, noţiuni esenţiale în formularea teoriilor gauge, care s-au impus în ultimii ani ca principal candidat pentru o teorie de unificare a tuturor interacţiunilor din natură. Acolo unde este cazul, se fac scurte referiri şi la probleme deosebit de actuale din fizica teoretică, cum ar fi cea a violării simetriei CP (conjugare de sarcină + paritate) a cărei rezolvare ar explica evoluţia Universului după Big Bang.

In acest context, cartea de faţă se adresează atât fizicienilor şi matematicienilor, cât şi tuturor celor care doresc să aprofundeze acest domeniu al fizicii teoretice.

Cu convingerea că materialul pe care îl prezentăm este susceptibil la îmbunătăţiri, vom fi sincer recunoscători tuturor celor care ne vor aduce propuneri în acest sens.

Autorii

BCU IAŞI

CUPRINS

Prefaţă		3
I. Metoda mecanicii analitice		7
I.1.	Formularea generală a problemei variaţionale	8
I.2.	Funcţionala acţiune. Principiul Hamilton. Funcţii Lagrange. Ecuaţiile Euler-Lagrange	11
I.3.	Variabile canonic conjugate. Funcţia şi ecuaţiile Hamilton	21
I.4.	Ecuaţia Hamilton-Jacobi	27
I.5.	Teorema Jacobi	29
I.6.	Mişcarea nerelativistă a punctului material liber	32
II. Apariţia fizicii cuantice. Premise experimentale şi teoretice		37
II.1.	Radiaţia termică. Legile radiaţiei corpului negru	38
II.2.	Teoria lui Planck: ipoteza cuantelor de energie	52
II.3.	Efectul fotoelectric	61
II.4.	Cuantele de lumină (fotonii) şi teoria lui Einstein asupra efectului fotoelectric	67
II.5.	Difuzia Rutherford. Modelul planetar al atomului	70
II.6.	Formula lui Balmer. Principiul de combinare Rydberg-Ritz	81
II.7.	Teoria lui Bohr asupra atomului de hidrogen şi a ionilor hidrogenoizi	84
II.8.	Invarianţii adiabatici ai mişcării. Generalizarea condiţiei Bohr de cuantificare	95
II.9.	Modelul atomic nerelativist Bohr-Sommerfeld-Wilson	107
II.10.	Teoria lui Sommerfeld asupra contribuţiei efectelor relativiste la structura fină a ionilor hidrogenoizi	118
II.11.	Efectul Compton	129
II.12.	Teoria elementară a efectului Compton	134
III. Caracterul ondulatoriu al microparticulelor		139
III.1.	Unda de Broglie asociată microparticulei libere	142
III.2.	Confirmarea experimentală a caracterului universal al ipotezelor de Broglie. Experimentul Davisson-Germer	149
III.3.	Modelul de Broglie: particula ca un pachet de unde asociate	152
III.4.	Inconsistenţa principială a identificării particulei cu grupul de unde de Broglie. Delocalizarea impuls-coordonată şi destrămarea pachetului	162

BCU UNIVERSITY LIBRARY

IV. Ecuaţia Schrödinger şi mecanica ondulatorie 177

IV.1. Justificarea ecuaţiei Schrödinger pe baza ipotezelor de Broglie şi a ecuaţiei d'Alembert 179

IV.2. Semnificaţia funcţiei de undă. Interpretarea probabilistă dată de Max Born 184

IV.3. Ecuaţia de continuitate a "fluidului" de probabilitatee 191

IV.4. Condiţiile de selectare a soluţiilor fizic acceptabile ale ecuaţiei Schrödinger 195

IV.5. Expresia semiclasică a funcţiei de undă. Principiul euristic în ecuaţia lui Schrödinger 210

IV.6. Ecuaţia de Evoluţie şi Principiul de Corespondenţă 221

V. Formalismul matematic al mecanicii cuantice I: Formalismul Schrödinger pe spaţiul $\mathfrak{L}^2$ al funcţiilor de undă 239

V.1. Studiul de principiu al integrării ecuaţiei Schrödinger temporale în cazul unei singure dimensiuni spaţiale, ca un exemplu care a condus la dezvoltarea formalismului matematic al mecanicii ondulatorii 241

V.2. Elemente de teoria spaţiilor Hilbert 253

V.3. Spaţiul Hilbert $\mathfrak{L}^2$ al funcţiilor pătratic integrabile în sens Lebesgue 280

V.4. Elemente de Teoria Operatorilor Liniari în Spaţii Hilbert 299

V.5. Operatori autoadjuncţi asociaţi mărimilor fizice fundamentale în Mecanica Cuantică. Proprietăţile acestora relative la ecuaţiile lor de vectori şi valori proprii 319

V.6. Comutatori 386

V.7. Expresia valorii medii a unei observabile în formalismul Schrödinger. Derivarea operatorilor în raport cu timpul şi teoremele lui Ehrenfest 405

V.8. Principiul de Incertitudine, un *cenzor* în microcosmos 431

VI. Formalismul matematic al mecanicii cuantice II : Formalismul Dirac pe spaţiul liniar abstract $\mathfrak{E}$ al vectorilor de stare 465

VI.1. Formalismul $<bra|ket>$ introdus de Dirac 466

VI.2. Reprezentări în spaţiul stărilor 476

VI.3. Schimbarea reprezentărilor în spaţiul stărilor 498

VI.4. Ecuaţii de vectori şi valori proprii în exprimare Dirac 520

VI.5. Reprezentările fundamentale $\{|\vec{r}>\}$ şi $\{|\vec{p}>\}$ 535

VI.6. Postulatele mecanicii cuantice 555

Bibliografie 559

Index alfabetic 563

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL I

METODA MECANICII ANALITICE

In acest capitol vom efectua o trecere în revistă a celor mai importante noţiuni, relaţii şi aspecte concrete, ale formalismului utilizat în Mecanica Analitică. Considerăm necesară tratarea acestui subiect la începutul unui tratat de Mecanică Cuantică, având în vedere următoarele două motivaţii:

- Pe de o parte, Mecanica Analitică reprezintă astăzi o disciplină fundamentală care, deşi a provenit din aşa numita mecanică sintetică, a căpătat, printr-un efort conjugat efectuat în secolul XVIII şi în prima jumătate a secolului XIX de către Leonhard Euler, Jean le Rond d'Alembert, Joseph Louis Lagrange, Pierre Louis-Moreau de Maupertuis, Carl Jacobi şi William Rowan Hamilton, un puternic caracter de abstractizare. Mai mult decât atât, coroborat cu universalitatea principiilor şi axiomelor sale, au permis Mecanicii Analitice să dezvolte o metodă (şi un formalism) cu adevărat generală şi generalizatoare, care stă la baza celor mai multe domenii şi discipline din Fizica Teoretică Modernă.
- Pe de altă parte, în ceea ce priveşte Mecanica Cuantică şi chiar disciplina mai perfecţionată, Teoria Cuantică a Câmpurilor, acestea se racordează la Mecanica Analitică şi operează curent cu formalismul ei, prin intermediul celor două principii cu caracter de universalitate, anume Principiul Corespondenţei (ca regulă de primă cuantificare) şi Principiul Euristic (ca principiu de continuitate a cunoaşterii). Se poate spune astăzi, la sfârşit de secol XX, că formularea "ştiinţific respectabilă" a oricărei teorii de câmp şi de interacţiune între câmpuri (incluzând pe lângă câmpurile bozonice şi câmpurile fermionice, materiale) trebuie, sau cel puţin este recomandabil, să aibă la bază, pe lângă cerinţa de invarianţă galileiană sau relativistă (simetrie

externă) şi invarianţa gauge (în raport cu grupurile asociate simetriilor interne), un principiu variaţional de tipul celui formulat de Hamilton cu privire la staţionaritatea funcţionalei acţiune asociate câmpurilor fizice considerate şi interacţiunilor dintre acestea.

După analiza, în primul paragraf, a formulării generale a problemei variaţionale, vom particulariza rezultatele acesteia la cazul unui sistem fizic cu un număr finit de grade de libertate, tratând destul de amănunţit principiul de staţionaritate a funcţionalei acţiune, .deducerea ecuaţiilor fundamentale Euler-Lagrange şi semnificaţia fizică a funcţiei Lagrange asociate sistemului. Definirea variabilelor canonic conjugate, construirea funcţiei Hamilton şi obţinerea ecuaţiilor canonice, vor reprezenta subiectul paragrafului I.3, iar ecuaţia Hamilton-Jacobi, ca un rezultat fundamental al Mecanicii Analitice, vor fi discutate în al patrulea şi al cincilea paragraf. Ultimul paragraf, I.6, tratează complet problema integrării ecuaţiei Hamilton-Jacobi în cazul analizei mişcării libere a punctului material.

I.1. Formularea generală a problemei variaţionale

Din dorinţa de a veni în ajutorul cititorului mai puţin avizat în domeniu, vom simplifica pe cât posibil cadrul discuţiei ce urmează şi vom considera ca varietate de bază, de dimensiune conexă "n", spaţiul real n-dimensional $\mathbb{R}^n$ (cu toate proprietăţile topologice şi de diferenţiabilitate obişnuite) în care fiecărui punct (p) îi corespunde n-uplul de numere reale $\chi(p) = (x^1,\ldots,x^n)$ unde, $x^1,\ldots,x^n$ reprezintă coordonatele carteziene ale punctului (p) din $\mathbb{R}^n$.

Fie $\{\Phi_a(x)\}_{a=\overline{1,f}}$ o mulţime finită, $f\in N$, de funcţii definite pe $\mathbb{R}^n$ cu valori în $\mathbb{R}$ şi de clasă $C^2(\mathbb{R}^n)$ (C^p este clasa funcţiilor de p ori derivabile şi cu a p-a derivată continuă), iar $\Lambda(\Phi_a;\Phi_{a,i};x)$ o funcţie definită pe $\mathbb{R}^{f+nf+n}$, cu

valori în $\mathbb{R}$, continuă în x pe $\mathbb{R}^n$ şi derivabilă în $\{\Phi_a; \Phi_{a,i}\}$ pe $\mathbb{R}^{f+nf}$.

Considerând D un domeniu din $\mathbb{R}^n$ cu închiderea $\overline{D}$ compactă şi cu frontiera ∂D netedă pe porţiuni, putem defini funcţionala integrală:

$$(1.1) \qquad \Im[\Phi_a] = \int_D \Lambda(\Phi_a; \Phi_{a,i}; x)\, d^n x,$$

unde prin $d^n x = dx^1 \ldots dx^n$ am notat n-volumul elementar, ca măsură de integrare pe $\mathbb{R}^n$, iar prin $\Phi_{a,i}$ am notat derivata parţială $\dfrac{\partial \Phi_a}{\partial x^i}$ a câmpului Φ_a în raport cu coordonata x^i.

Ca principal subiect al disciplinei matematice numită Calculul Variaţiilor, problema variaţională cere să se determine setul de funcţii $\{\Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}$, cu valori date pe frontiera ∂D, care asigură staţionaritatea funcţionalei $\Im[\Phi]$.

Pentru rezolvarea acestei probleme să operăm asupra setului de funcţii $\{\Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}$ variaţiile virtuale $\{\delta\Phi_a = \Phi'_a - \Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}$ satisfăcând condiţiilor de definiţie:

(i) $\left[\{\delta\Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}\right]_{\partial D} = \{0\}_{a=\overline{1,f}}$

(ii) $\left[\{\delta\Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}\right]_D$ arbitrar în D

(iii) $\{\delta x^i\}_{i=\overline{1,n}} = \{0\}_{i=\overline{1,n}}$.

Din (ii) şi (iii) rezultă evident că $\delta[\Phi_{a,i}] = (\delta\Phi_a)_{,i}$ peste tot în D, oricare ar fi $a=\overline{1,f}$ şi $i=\overline{1,n}$. Sub acţiunea variaţiilor virtuale $\{\delta\Phi_a\}_{a=\overline{1,f}}$, funcţionala integrală $\Im[\Phi]$ se va comporta după cum urmează:

BIBLIOTECA UNIVERSITATEA FIZICA

$$\delta\mathfrak{S}[\Phi] = \int_D \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} \delta\Phi_a + \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \delta\left(\Phi_{a,i}\right) \right] d^n x =$$

(1.2)

$$= \int_D \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} \delta\Phi_a + \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \left(\delta\Phi_a\right)_{,i} \right] d^n x,$$

unde am utilizat convenţia de sumare după indicele care se repetă.
Evidenţiind în membrul drept al ecuaţiei variaţionale (1.2) formarea unei n-divergenţe

$$(1.3) \quad \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \left(\delta\Phi_a\right)_{,i} = \left[\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \delta\Phi_a \right]_{,i} - \left[\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \right) \right] \cdot \delta\Phi_a$$

şi aplicând teorema Green-Gauss-Ostrogradski, rezultă

$$\delta\mathfrak{S}[\Phi] = \int_{\partial D} \delta\Phi_a \cdot \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} n_i \, d^{n-1} x -$$

$$- \int_D \left[\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \right) - \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} \right] \delta\Phi_a \, d^n x,$$

n_i fiind componentele versorului normalei la ∂D, de unde, având în vedere condiţia de definiţie (i), obţinem expresia "prefinală"

$$(1.4) \quad \delta\mathfrak{S}[\Phi] = -\int_D \left[\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}} \right) - \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} \right] \delta\Phi_a \, d^n x.$$

Condiţia necesară de staţionaritate a funcţionalei integrale $\mathfrak{S}[\Phi]$ cere ca oricare ar fi variaţiile virtuale de ordinul întâi $\left\{\delta\Phi_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$ să fie satisfăcută ecuaţia variaţională

$$(1.5) \quad \delta\mathfrak{S}[\Phi] = 0,$$

ceea ce revine în exprimare locală la necesitatea ca setul de funcţii $\left\{\Phi_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$, cu condiţiile la frontieră $\left\{\left[\Phi_a(x)\right]_{\partial D}\right\}_{a=\overline{1,f}} = \left\{\left[\varphi_a(x)\right]_{\partial D}\right\}_{a=\overline{1,f}}$ să reprezinte o soluţie

BCU "ŞTIINŢĂ" UNIVERSITY LIBRARY

a f-sistemului de ecuaţii diferenţiale, în general neliniare, cu derivate parţiale de ordinul doi

$$(1.6)\qquad \frac{\partial}{\partial x^i}\left[\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}}\right] - \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} = o \quad ; \quad a=\overline{1,f}$$

numit "sistemul ecuaţiilor Euler", sau, de asemenea, în literatura de specialitate din fizica teoretică,"sistemul fundamental al ecuaţiilor de câmp".

In încheierea acestui paragraf, profitând de forma relaţiei (1.4), putem defini derivata funcţională a funcţiei $\Lambda(\Phi;\partial\Phi;x)$ în raport cu oricare din câmpurile $\{\Phi_a(x)\}_{a=\overline{1,f}}$

$$(1.7)\qquad \frac{\delta \Lambda}{\delta \Phi_a} = \frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_a} - \frac{\partial}{\partial x^i}\left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \Phi_{a,i}}\right)$$

cu ajutorul căreia relaţia (1.4) devine

$$(1.8)\qquad \delta \mathfrak{F}[\Phi] = \int_D \frac{\delta \Lambda}{\delta \Phi_a}\delta \Phi_a \, d^n x.$$

Aceasta conduce la următoarea formă funcţională, deosebit de simplă, de exprimare a sistemului fundamental al ecuaţiilor de câmp

$$(1.9)\qquad \frac{\delta \Lambda}{\delta \Phi_a} = 0.$$

I.2. Funcţionala acţiune. Principiul Hamilton. Funcţii Lagrange. Ecuaţiile Euler-Lagrange

In continuare, vom particulariza rezultatele paragrafului precedent la unul din cazurile foarte importante în Mecanica Analitică, Teoria Relativităţii şi chiar, la un nivel generalizat, în Mecanica Cuantică, anume la cazul sistemelor fizice cu un număr finit f de grade de libertate. In acest sens, fie $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ setul complet de variabile dinamice asociate sistemului, considerate ca funcţii de clasă $C^2(\mathbb{R})$ cu valori în $\mathbb{R}$ şi denumite coordonate generalizate ale

sistemului în spaţiul model de configuraţie $\mathbb{R}^f$. Din punct de vedere cinematic, adică atunci când dependenţa temporală între două momente $t_1 \le t \le t_2$, $[t_1,t_2] \subset \mathbb{R}$, a coordonatelor generalizate $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,f}}$ este dată, evoluţia sistemului este reprezentată de curba $\gamma(t):[t_1,t_2] \to \mathbb{R}^f$, dată prin $\gamma(t) = (x^1(t),\ldots,x^f(t))$, şi denumită traiectoria sistemului în spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^f$. Din punct de vedere dinamic, adică atunci când este cunoscut sistemul celor f ecuaţii diferenţiale ordinare, de ordinul II (denumit pentru prescurtare "sistemul ecuaţiilor de mişcare"), având coordonatele generalizate drept cele f funcţii necunoscute, a determina evoluţia sistemului fizic înseamnă a găsi traiectoria $\gamma(t):[t_1,t_2] \to \mathbb{R}^f$ din spaţiul model de configuraţie, prin integrarea sistemului ecuaţiilor de mişcare

$$(2.1) \qquad F_a\left[\frac{d^2x^c}{dt^2},\frac{dx^c}{dt},x^c,t\right] = 0 \quad , \quad a,c=\overline{1,f}$$

cu datele iniţiale, de tip Cauchy:

$$a) \qquad \left\{x^a(t_1)\right\}_{a=\overline{1,f}} = \left\{x_0^a\right\}_{a=\overline{1,f}}$$

(2.2)

$$b) \qquad \left\{\frac{dx^a}{dt}(t_1)\right\}_{a=\overline{1,f}} = \left\{v_0^a\right\}_{a=\overline{1,f}}.$$

Formularea principiului Hamilton pentru un sistem cu f grade de libertate are la bază caracterizarea acestuia printr-o funcţie $L(x^a;\dot{x}^a;t)$, continuă pe $\mathbb{R}$ în raport cu t şi derivabilă pe $\mathbb{R}^{2f}$ în raport cu $\{x^a;\dot{x}^a\}_{a=\overline{1,f}}$, denumită funcţia Lagrange asociată sistemului, cu ajutorul căreia se defineşte, în mod cu totul similar funcţionalei integrale (1.1) dar prin particularizare la varietatea de bază $\mathbb{R}$, funcţionala acţiune pentru sistemul considerat

$$(2.3) \qquad S[x] = \int_{t_1}^{t_2} L\,(x^a;\dot{x}^a;t)\,dt.$$

Relativ la expresia (2.3), principiul lui Hamilton se enunţă astfel:

Funcţionala acţiune $S[x]$ evaluată pe traiectoria reală $\gamma:[t_1,t_2]\to\mathbb{R}^f$ din spaţiul model de configuraţie este staţionară în raport cu orice altă traiectorie virtuală infinit vecină, care conectează aceleaşi configuraţii terminale, adică

$$(2.4) \qquad \delta S[x] = \delta \int_{t_1}^{t_2} L\,(x^a;\dot{x}^a;t)\,dt = 0.$$

In acord cu condiţiile de definiţie (i), (ii), (iii), de la I.1, operăm asupra coordonatelor generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ variaţiile virtuale de ordinul I, $\{\delta x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ satisfăcând condiţiilor:

(j) $\left[\{\delta x^a\}_{a=\overline{1,f}}\right]_{t_1,t_2} = \{0\}_{a=\overline{1,f}}$

(jj) $\left[\{\delta x^a\}_{a=\overline{1,f}}\right]_{t\in[t_1,t_2]}$ arbitrar

(jjj) $\delta t = 0.$

Variaţia virtuală a funcţionalei acţiune devine

$$(2.5) \qquad \delta S[x] = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial x^a}\delta x^a + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\delta \dot{x}^a \right] dt,$$

de unde rezultă, utilizând proprietatea de comutativitate $\delta\cdot\frac{d}{dt} = \frac{d}{dt}\cdot\delta$,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\delta S[x] = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x^a}\delta x^a dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a} \cdot \frac{d}{dt}(\delta x^a)\, dt =$$

(2.6)

$$= \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial x^a}\delta x^a dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a} d(\delta x^a)$$

şi integrând prin părţi ultimul termen din membrul drept, avem

$$(2.7) \qquad \delta S[x] = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial x^a} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\right)\right] \delta x^a dt + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\delta x^a\right]_{t_1}^{t_2}.$$

In virtutea condiţiei (j) variaţiile configuraţiilor terminale sunt nule, ceea ce ne conduce, din (2.7), la expresia finală a variaţiei funcţionalei acţiune a sistemului

$$(2.8) \qquad \delta S[x] = -\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\right) - \frac{\partial L}{\partial x^a}\right] \delta x^a dt.$$

Variaţiile $\{\delta x^a\}_{a=\overline{1,f}}$, în intervalul (t_1,t_2), fiind arbitrare de ordinul I, condiţia de staţionaritate (2.4) se reduce, în exprimare locală, la următorul sistem de f ecuaţii diferenţiale ordinare, de ordinul II, pentru cele f coordonate generalizate:

$$(2.9) \qquad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\right) - \frac{\partial L}{\partial x^a} = 0$$

numit "sistemul Euler-Lagrange al ecuaţiilor de mişcare" sau, simplu, "ecuaţiile Euler-Lagrange".

In mod cu totul analog introducerii derivatei funcţionale (1.8), putem defini derivata funcţională în raport cu coordonatele generalizate a funcţionalei acţiune $S[x]$. In acest sens, avem:

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(2.10) $$\delta S[x] = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta L}{\delta x^a}\,\delta x^a dt = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial x^a} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\right)\right] \delta x^a dt,$$

de unde rezultă expresia derivatei funcţionale a lagrangeianului

(2.11) $$\frac{\delta L}{\delta x^a} = \frac{\partial L}{\partial x^a} - \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\right]$$

şi forma funcţională a ecuaţiilor Euler-Lagrange

(2.12) $$\frac{\delta L}{\delta x^a} = 0.$$

In cele discutate până acum, am afirmat că funcţia Lagrange este o funcţie caracteristică a sistemului fizic considerat, am obţinut cu ajutorul ei ecuaţiile Euler-Lagrange ce caracterizează dinamica sistemului, dar nu am spus nimic despre modelul concret de definiţie a funcţiei Lagrange şi despre semnificaţia ei fizică. De aceste două aspecte ne ocupăm în continuare, analizând cazul simplu, dar destul de general, al sistemului uniparticulă cu 3 grade de libertate. Se consideră deci un punct material de masă m, supus acţiunii efective unei forţe dependente explicit de timp şi de poziţia şi viteza punctului material, adică $\vec{F} = \vec{F}(\vec{r},\vec{v},t)$. Utilizând drept coordonate generalizate chiar coordonatele carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$ în raport cu care pătratul elementului de distanţă are expresia

(2.13) $$dl^2 = \delta_{ik} dx^i dx^k = dx^i \cdot dx^i,\ \delta_{ik} = \delta\text{-}Kronecker = \begin{cases} 1, & i=k \\ 0, & i\neq k \end{cases}$$

ecuaţia de mişcare a punctului material va avea forma cunoscută din Mecanica Clasică

(2.14) $$\frac{d}{dt} m\dot{x}^i = F^i.$$

Contractând cele trei ecuaţii (2.14) cu deplasările virtuale $\{\delta x^i\}_{i=\overline{1,3}}$ şi integrând în raport cu timpul între momentele t_1, t_2, obţinem

$$(2.15)\quad \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt}(m\dot{x}^i)\,\delta x^i dt = \int_{t_1}^{t_2} d(m\dot{x}^i \delta x^i) - \int_{t_1}^{t_2} m\dot{x}^i\,\delta\dot{x}^i dt = \int_{t_1}^{t_2} F^i \delta x^i dt,$$

ceea ce revine, având în vedere că $\delta x^i(t_1)=\delta x^i(t_2)=0$, la ecuaţia variaţională exprimată în formulare integrală

$$(2.16)\quad \int_{t_1}^{t_2} \left[\delta\left(\frac{1}{2}m\,|\dot{x}|^2\right) + F_i \delta x^i\right] dt = 0.$$

Din forma ecuaţiei (2.16) este evident că <u>dacă</u> forţa $\vec{F}$ provine dintr-un <u>potenţial generalizat</u> $U(x,\dot{x},t)$, adică

$$(2.17)\quad \int_{t_1}^{t_2} F_i\,\delta x^i dt = -\int_{t_1}^{t_2} \frac{\delta U}{\delta x^i}\,\delta x^i dt = -\int_{t_1}^{t_2} \delta U dt,$$

atunci (2.16) se reduce la ecuaţia

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{1}{2}m\,|\dot{x}|^2 - U(x,\dot{x},t)\right] dt = 0.$$

De aici rezultă, prin comparare directă cu ecuaţia (2.4), care exprimă principiul de staţionaritate a funcţionalei acţiune, funcţia Lagrange pentru sistemul considerat, de forma

$$(2.18)\quad L(x,\dot{x},t) = \frac{1}{2}m\,|\dot{x}|^2 - U(x,\dot{x},t).$$

Din analiza dimensională a relaţiei de definiţie (2.18) rezultă că lagrangeianul sistemului are dimensiunea de energie ($M\,L^2T^{-2}$), iar acţiunea asociată, după cum se vede imediat din (2.3), are dimensiunea de energie x timp ($M\,L^2\,T^{-1}$).

In ce priveşte posibilitatea ca forţa $\vec{F}$ să provină dintr-un potenţial generalizat U, menţionăm că acest lucru <u>nu</u> este de la sine înţeles. Astfel, utilizând (2.17), să analizăm condiţiile pe care trebuie să le îndeplinească

BCU "ALEXANDRU IOAN CUZA" UNIVERSITY LIBRARY

funcţia $U(x,\dot{x},t)$, respectiv forţa $\vec{F}$, pentru a fi un potenţial generalizat, respectiv o forţă care provine dintr-un potenţial generalizat.

Pentru aceasta, să înlocuim în relaţia de definiţie (2.11) lagrangeianul cu funcţia U şi coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ cu coordonatele carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$. Rezultă expresia derivatei funcţionale a funcţiei $U(x,\dot{x},t)$

$$(2.19)\quad \frac{\delta U}{\delta x^i} = \frac{\partial U}{\partial x^i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{x}^i}\right),$$

care înlocuită în (2.17) ne conduce la componentele forţei asociate

$$(2.20)\quad F_i = -\frac{\delta U}{\delta x^i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{x}^i}\right) - \frac{\partial U}{\partial x^i}.$$

Calculând în (2.20) derivata totală în raport cu timpul, rezultă

$$(2.21)\quad F_i = -\frac{\partial U}{\partial x^i} + \frac{\partial^2 U}{\partial t \partial \dot{x}^i} + \dot{x}^k \frac{\partial^2 U}{\partial x^k \partial \dot{x}^i} + \ddot{x}^k \frac{\partial^2 U}{\partial \dot{x}^k \partial \dot{x}^i}$$

în care este natural, din punct de vedere clasic , să cerem independenţa explicită a componentelor F_i ale forţei de componentele $\ddot{x}^k$ ale acceleraţiei punctului material. Această cerinţă este satisfăcută "automat" dacă şi numai dacă funcţia $U(x,\dot{x},t)$ are proprietatea că

$$(2.22)\quad \frac{\partial^2 U}{\partial \dot{x}^i \partial \dot{x}^k} = 0 \quad , \quad (\forall)\ i,k=\overline{1,3}.$$

Integrând sistemul de ecuaţii (2.22) în raport cu variabilele $\dot{x}$, privite ca variabile independente faţă de x şi t, obţinem forma pe care trebuie să o posede funcţia $U(x,\dot{x},t)$ pentru a fi un potenţial generalizat

$$(2.23)\quad U(x,\dot{x},t) = W(x,t) - \dot{x}^i A_i(x,t)$$

şi de asemenea, din (2.21), rezultă expresiile componentelor forţei $\vec{F}$ provenite din potenţialul generalizat (2.23)

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(2.24) $$F_i = -\frac{\partial W}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial t} + \dot{x}^k \left[\frac{\partial A_k}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^k} \right].$$

Inlocuind (2.23) în (2.18) obţinem forma cea mai generală pentru lagrangeianul unei particule nerelativiste de energie potenţială generalizată $U(x,\dot{x},t)$, adică

(2.25) $$L = \frac{1}{2} m |\dot{x}|^2 + (\dot{x}, A(x,t)) - W(x,t),$$

unde $(\dot{x}, A(x,t))$ reprezintă produsul scalar al vectorului vitezei generalizate cu vectorul A asociat potenţialului generalizat.

Concluzii şi observaţii

a) Odată identificat lagrangeianul $L(x^a,\dot{x}^a,t)$ al unui sistem fizic cu un număr finit de grade de libertate, dinamica acestuia este complet determinată, din punct de vedere clasic, de soluţiile $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,f}}$ ale ecuaţiilor Euler-Lagrange (2.9).

b) Ca structură generală, lagrangeianul unui sistem fizic care posedă energia potenţială generalizată U, este de forma

(2.26) $$L = \frac{1}{2} m_{ab} \dot{x}^a \dot{x}^b - U(x^a,\dot{x}^a,t),$$

unde m_{ab} sunt componentele unui tensor simetric de ordinul 2, denumit tensorul masei şi care, de exemplu în cazul unui sistem de N puncte materiale de mase $\{m_\alpha\}_{\alpha=\overline{1,N}}$ şi coordonate carteziene $\{x_\alpha^i\}_{\alpha=\overline{1,N}}^{i=\overline{1,3}}$ are expresia

$$m_{ab} = \sum_{\alpha=1}^{N} m_\alpha \delta_{ik} \frac{\partial x_\alpha^i}{\partial x^a} \cdot \frac{\partial x_\alpha^k}{\partial x^b}.$$

Forţele active ce vor acţiona în sistem şi provin din potenţialul

generalizat U sunt date de relaţia

(2.27) $$F_a = -\frac{\delta U}{\delta x^a} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{x}^a}\right) - \frac{\partial U}{\partial x^a}.$$

c) Condiţia de independenţă explicită a componentelor F_a ale forţei active de componentele $\ddot{x}^a$ ale acceleraţiei generalizate fixează în mod univoc, până la un sistem de (f+1)-funcţii $\{A_a(x,t),\ W(x,t)\}_{a=\overline{1,f}}$, forma potenţialului generalizat

(2.28) $$U(x,\dot{x},t) = W(x,t) - \dot{x}^c A_c(x,t),$$

care, înlocuită în (2.26), conduce la expresia concretă a lagrangeianului asociat sistemului cu coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ drept cele f grade de libertate

(2.29) $$L = \frac{1}{2} m_{ab}\dot{x}^a\dot{x}^b + \dot{x}^c A_c(x,t) - W(x,t).$$

d) In cazul particular în care funcţia U este independentă de vitezele generalizate $\{\dot{x}^a\}_{a=\overline{1,f}}$, rezultă din (2.20) sau (2.27) că pentru componentele forţei active avem expresiile

$$F_a = -\frac{\partial U}{\partial x^a},$$

care coroborate cu relaţiile (2.23) sau (2.28), în care componentele $\{A_c(x,t)\}_{c=\overline{1,f}}$ ale f-vectorului potenţial A sunt nule, se reduc la forma

(2.30) $$F_a = -\frac{\partial W(x,t)}{\partial x^a}.$$

De aici deducem că funcţia $W(x,t)$ are semnificaţia aşa numitului potenţial simplu. Atragem atenţia că, din cauza dependenţei de timp, potenţialul simplu nu este un potenţial conservativ.

e) Numai în cazul cu totul particular, când potenţialul generalizat (2.28)

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

este independent de timp şi de vitezele generalizate, $W(x)$ are semnificaţia unei energii potenţiale, iar componentele (2.30) reprezintă în mod exact componentele forţei active conservative asociate energiei potenţiale $W(x)$. In această situaţie, lagrangeianul (2.29) ia forma "obişnuită"

$$L = \frac{1}{2} m_{ab} \dot{x}^a \dot{x}^b - W(x) \tag{2.31}$$

corespunzătoare diferenţei dintre energia cinetică şi energia potenţială a sistemului plasat într-un câmp conservativ.

f) Dacă revenim la expresia (2.25) şi presupunem că particula de masă m are o sarcină generalizată q, prin care se cuplează la un câmp exterior descris de potenţialul vector $\{A_i(x,t)\}_{i=\overline{1,3}}$ şi potenţialul scalar $V(x,t)$, atunci lagrangeianul (2.25) devine

$$L = \frac{1}{2} m |\dot{x}|^2 + q \left[\dot{x}^i A_i(x,t) - V(x,t) \right] \tag{2.32}$$

şi reprezintă, în cazul în care q este o sarcină electrică, lagrangeianul unei particule nerelativiste, electric încărcate, plasată într-un câmp electromagnetic descris de potenţialul vector $\vec{A}(x,t)$ şi potenţialul scalar $V(x,t)$.

g) In fine, se poate verifica fără dificultate că ecuaţiile Euler-Lagrange (2.9) aplicate lagrangeianului (2.25) conduc la ecuaţiile de mişcare (2.14) cu expresiile (2.24) pentru componentele F_i ale forţei active definite prin relaţia (2.20).

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

I.3. Variabile canonic conjugate. Funcţia şi ecuaţiile Hamilton

Pentru a fixa de la început semnificaţiile fizice ale unora dintre aspectele ce le vom discuta în continuare, să pornim de la cazul simplu al unei particule de masă m, aflată în mişcare nerelativistă, într-un câmp exterior conservativ care îi conferă energia potenţială $W(x)$. Numărul gradelor de libertare fiind f=3, iar tensorul (m_{ab}) al masei având expresia

(3.1) $\quad m_{ab} = m\delta_{ab}$

lagrangeianul (2.31) capătă forma deosebit de simplă

(3.2) $\quad L = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2 - W(x).$

Să explicităm acum ecuaţiile Euler-Lagrange (2.9) pentru expresia (3.2) a lagrangeianului sistemului. Avem următoarele relaţii:

(3.3)

a) $\quad \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a} = m\dot{x}_a \quad \text{cu} \quad \dot{x}_a = \delta_{ab}\dot{x}^b$

b) $\quad \frac{\partial L}{\partial x^a} = -\frac{\partial W}{\partial x^a},$

prin care ecuaţiile (2.9) capătă forma obişnuită din Mecanica Clasică, anume

(3.4) $\quad \frac{d}{dt}(m\dot{x}_a) = -\frac{\partial W}{\partial x^a},$

din care rezultă, în mod evident, semnificaţia de componentă covariantă a impulsului mecanic, pentru mărimea $m\dot{x}_a$, adică

(3.5) $\quad p_a = m\dot{x}_a$

şi de componentă covariantă a forţei conservative, pentru mărimea $-\frac{\partial W}{\partial x^a}$, adică

$$F_a = -\frac{\partial W}{\partial x^a}.$$

In plus, ne convingem imediat că, dacă energia potenţială $W(x)$ nu depinde explicit de una din coordonatele generalizate, de exemplu x^3, atunci componenta covariantă F_3 a forţei conservative este zero, iar din ecuaţia (3.4) pentru a=3 rezultă imediat conservarea componentei $p_3 = m\dot{x}_3$ a impulsului mecanic, rezultat care, din punct de vedere clasic, era întru totul de aşteptat.

Aspectele deosebit de importante pe care le deducem prin generalizarea acestui exemplu sunt, pentru început, în număr de două:

- Pe de o parte, înlocuind relaţia (3.5) în relaţia (3.3.a) obţinem expresia

(3.6) $$p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a},$$

care are un grad cu mult mai general decât fiecare din cele două relaţii (3.5) şi (3.3.a) luate "ad litteram" şi anume reprezintă relaţia de definiţie a impulsului generalizat asociat coordonatei generalizate x^a.

- Pe de altă parte, înlocuind relaţia de definiţie (3.6) şi relaţia (3.3.b) în ecuaţia de mişcare (3.4) reobţinem ecuaţiile Euler-Lagrange, independente de forma concretă a lagrangeianului, şi anume

(3.7) $$\dot{p}_a = \frac{\partial L}{\partial x^a},$$

din care se vede imediat că dacă lagrangeianul este independent de una din coordonatele generalizate, atunci impulsul generalizat asociat acesteia se conservă. Dând numele de coordonată ciclică acelei coordonate generalizate de care nu depinde lagrangeianul sistemului, ajungem la următoarea teoremă generală de conservare: *Impulsul generalizat asociat unei coordonate ciclice se conservă.*

BCU IAŞI / CENTRUL UNIVERSITAR

Datorită legăturii intime ce există între impulsul generalizat p_a, şi coordonata generalizată corespunzătoare x^a, cât şi datorită faptului că produsul impulsului generalizat cu coordonata generalizată asociată are în mod constant dimensiunea fizică de acţiune, adică

$$\left[p_a x^a\right] = [\textit{energie x timp}] = kg \cdot m^2 \cdot s^{-1},$$

aceste două mărimi au primit denumirea de "mărimi canonic conjugate" sau încă "variabile canonic conjugate".

Rolul dinamic al variabilelor canonic conjugate devine evident, în cadrul aşa numitei "formulări hamiltoniene" a Mecanicii Analitice de care ne ocupăm în cele ce urmează.

Fie deci un sistem fizic cu coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ corespunzătoare celor f grade de libertate şi caracterizat de funcţia Lagrange asociată $L(x^a;\dot{x}^a;t)$. In raport cu coordonatele ei naturale, diferenţiala funcţiei Lagrange are expresia

$$(3.8) \qquad dL = \frac{\partial L}{\partial x^a}dx^a + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}d\dot{x}^a + \frac{\partial L}{\partial t}dt.$$

Inlocuind în (3.8) relaţia de definiţie (3.6) şi considerând satisfăcute ecuaţiile Euler-Lagrange (3.7) obţinem

$$(3.9) \qquad dL = \dot{p}_a dx^a + p_a d\dot{x}^a + \frac{\partial L}{\partial t}dt,$$

care este identică cu expresia

$$(3.10) \qquad d\left[p_a\dot{x}^a - L\right] = -\dot{p}_a dx^a + \dot{x}^a dp_a - \frac{\partial L}{\partial t}dt.$$

Aspectul deosebit de important evidenţiat de relaţia (3.10) este acela că în membrul ei stâng apare o altă funcţie caracteristică, $p_a\dot{x}^a - L$, iar din diferenţiala ei din dreapta egalităţii rezultă că ea are drept coordonate naturale chiar variabilele canonic conjugate şi timpul, adică $\{x^a, p_a, t\}_{a=\overline{1,3}}$. Această nouă funcţie caracteristică se numeşte funcţia Hamilton asociată, sau simplu hamiltonianul sistemului, şi are drept relaţie de definiţie expresia

(3.11) $H(x^a,p_a,t) = p_a\dot{x}^a - L(x^a;\dot{x}^a;t)$.

Evident, prin rezolvarea sistemului (3.6) în raport cu vitezele generalizate $\{\dot{x}^a\}_{a=\overline{1,f}}$, acestea vor depinde numai de variabilele canonic conjugate $\{x^a,p_a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi timpul t, ceea ce conduce, prin înlocuirea lor în relaţia (3.11), la definirea consistentă a hamiltonianului, în care acesta depinde numai de coordonatele sale naturale, aşa cum se afirmă în membrul stâng din (3.11).

Explicitând diferenţiala hamiltonianului $H(x^a,p_a,t)$ obţinem

$$dH = \frac{\partial H}{\partial x^a}dx^a + \frac{\partial H}{\partial p_a}dp_a + \frac{\partial H}{\partial t}dt$$

expresie care, identificată cu (3.10), conduce la relaţia

$$\frac{\partial H}{\partial x^a}dx^a + \frac{\partial H}{\partial p_a}dp_a + \frac{\partial H}{\partial t}dt = -\dot{p}_a dx^a + \dot{x}^a dp_a - \frac{\partial L}{\partial t}dt,$$

care se scrie sub forma

$$\left(\frac{\partial H}{\partial x^a} + \dot{p}_a\right)dx^a + \left(\frac{\partial H}{\partial p_a} - \dot{x}^a\right)dp_a + \left(\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial t}\right)dt \equiv 0,$$

din care, având în vedere independenţa de principiu a coordonatelor naturale $\{x^a,p_a,t\}_{a=\overline{1,f}}$ ale hamiltonianului H, rezultă următorul sistem de 2f-ecuaţii diferenţiale de ordinul I:

(3.12)

a) $$\dot{x}^a = \frac{\partial H}{\partial p_a}$$

b) $$\dot{p}_a = -\frac{\partial H}{\partial x^a},$$

numite "ecuaţiile canonice sau ecuaţiile Hamilton" şi de asemenea relaţia

(3.13) $$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t},$$

care sincronizează explicit hamiltonianul cu lagrangeianul din care a fost

obţinut.

Pentru ca formularea hamiltoniană discutată până acum (ne referim la relaţiile (3.9) până la (3.13) inclusiv) să fie riguros echivalentă formulării lagrangeiene prezentată în paragraful anterior, trebuie să demonstrăm că ecuaţiile canonice (3.12) sunt complet echivalente ecuaţiilor Euler-Lagrange (2.9), adică să arătăm că principiul de staţionaritate a funcţionalei acţiune (2.4) impune drept ecuaţii de mişcare ecuaţiile Hamilton (3.12). In adevăr, înlocuind în ecuaţia variaţională (2.4) funcţia Lagrange explicitată din relaţia de definiţie (3.11) în raport cu hamiltonianul, obţinem

$$(3.14)\quad \int_{t_1}^{t_2} \delta\left[p_a\dot{x}^a - H(x^a,p_a,t)\right]dt = 0,$$

ceea ce înseamnă

$$(3.15)\quad \int_{t_1}^{t_2} \left[\dot{x}^a\delta p_a + p_a\frac{d}{dt}(\delta x^a) - \frac{\partial H}{\partial x^a}\delta x^a - \frac{\partial H}{\partial p_a}\delta p_a\right]dt = 0.$$

Integrând prin părţi al doilea termen din (3.15) şi având în vedere invarianţa configuraţiilor terminale, obţinem ecuaţia

$$(3.16)\quad \int_{t_1}^{t_2} \left\{\left[\dot{x}^a - \frac{\partial H}{\partial p_a}\right]\delta p_a - \left[\dot{p}_a + \frac{\partial H}{\partial x^a}\right]\delta x^a\right\}dt = 0.$$

Cum variaţiile virtuale $\left\{\delta x^a,\ \delta p_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$ ale variabilelor canonic conjugate $\left\{x^a,\ p_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$ sunt considerate arbitrare de ordinul I şi independente, rezultă că ecuaţia variaţională şi integrală (3.16) este identic satisfăcută numai dacă, local, variabilele canonic conjugate $\left\{x^a(t),\ p_a(t)\right\}_{a=\overline{1,f}}$ sunt soluţii ale ecuaţiilor Hamilton (3.12). In felul acesta am demonstrat că cele f-ecuaţii diferenţiale ordinare de ordinul II, care reprezintă ecuaţiile Euler-Lagrange (2.9) sunt complet echivalente celor 2f-ecuaţii diferenţiale ordinare de ordinul I, care reprezintă ecuaţiile canonice (3.12).

BUCUREŞTI CENTRUL UNIVERSITAR LIBRARY

Concluzii şi observaţii

a) Dat fiind lagrangeianul $L(x,\dot{x},t)$ al unui sistem fizic cu un număr finit f de grade de libertate, hamiltonianul asociat acestuia se obţine din relaţia de definiţie (3.11), în care vitezele generalizate $\dot{x}$ se înlocuiesc prin explicitarea lor din relaţiile de definiţie (3.6) ale impulsurilor canonic conjugate.

b) Odată determinat hamiltonianul sistemului fizic considerat, dinamica acestuia este descrisă de variabilele canonic conjugate $\{x^a(t),\ p_a(t)\}_{a=\overline{1,f}}$ obţinute ca soluţii ale ecuaţiilor Hamilton (3.12), iar dependenţa explicită de timp a hamiltonianului este sincronizată cu cea a lagrangeianului prin ecuaţia (3.13).

c) Toate coordonatele ciclice ale lagrangeianului sunt de asemenea coordonate ciclice ale hamiltonianului, iar impulsurile generalizate, canonic conjugate coordonatelor ciclice respective, reprezintă un set de integrale prime ale mişcării.

d) În cazul în care lagrangeianul nu depinde explicit de timp, din ecuaţia (3.13) rezultă că aceeaşi proprietate o va avea şi hamiltonianul şi, mai mult, din ecuaţia

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x^a}\dot{x}^a + \frac{\partial H}{\partial p_a}\dot{p}_a = \frac{\partial H}{\partial x^a}\frac{\partial H}{\partial p_a} - \frac{\partial H}{\partial p_a}\frac{\partial H}{\partial x^a} \equiv 0$$

rezultă că hamiltonianul $H(x,p)$ este o integrală primă a mişcării, având semnificaţia de energie totală a sistemului fizic (mecanic) considerat.

e) În general, pentru un sistem caracterizat de potenţialul generalizat (2.28), funcţia lui Hamilton nu reprezintă o integrală primă şi nici nu are semnificaţia energiei totale a sistemului. În particular, se poate întâmpla totuşi una din următoarele două situaţii:
- Hamiltonianul este o constantă a mişcării, fără a fi însă egal cu energia totală.
- Hamiltonianul este egal cu energia totală a sistemului, fără a fi însă o integrală primă a mişcării.

f) Apariţia uneia, sau a nici uneia, din aceste situaţii este indicat să fie verificată în cadrul sistemului concret considerat.

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITARĂ

I.4. Ecuaţia Hamilton-Jacobi

Pe lângă cele două formulări, lagrangeiană şi respectiv, hamiltoniană, ale Mecanicii Analitice, mai există încă o formulare care, deşi din punct de vedere istoric este ulterioară primelor două, este considerată în literatura de specialitate ca fiind fundamentală, deoarece operează direct cu cel mai important concept al Mecanicii Analitice, şi nu numai al ei, anume conceptul de acţiune a unui sistem fizic, şi este denumită "formularea de acţiune" sau încă "metoda Hamilton-Jacobi". Centrul de forţă al formulării de acţiune, după cum este şi titlul paragrafului de faţă, este reprezentat de ecuaţia Hamilton-Jacobi, iar din multitudinea variantelor de deducere a acestei ecuaţii, două sunt deosebit de directe, uşor diferite ca punere de problemă, dar complet echivalente în rezultatele finale.

Prima metodă de deducere a ecuaţiei Hamilton-Jacobi are la bază analiza variaţiei în timp a funcţionalei acţiune de-a lungul uneia dintre liniile de univers posibile din spaţiul extins de configuraţie $\mathbb{R}^{f+1}$. Fie deci, un sistem fizic cu f grade de libertate, caracterizat de coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi $\Gamma(\sigma):\mathbb{R}\to\mathbb{R}^{f+1}$, dată prin $\Gamma(\sigma) = (x^1(\sigma),\ldots,x^f(\sigma),t(\sigma))$, una din liniile de univers urmată de sistem în spaţiul extins de configuraţie. Dacă utilizăm o parametrizare temporală, adică $\sigma=t$, atunci poziţia instantanee a sistemului considerat, în spaţiul $\mathbb{R}^{f+1}$, va fi dată de (f+1)-uplul $(x^1(t),\ldots,x^f(t),t)$, iar acţiunea asociată sistemului, calculată de-a lungul liniei de univers considerate, între un moment arbitrar fixat, de exemplu $t=0$ şi momentul curent t, va fi dată, cu ajutorul funcţiei Lagrange asociate, de expresia bine cunoscută

$$(4.1)\qquad S\{[x],t\} = \int_0^t L(x;\dot{x};t)\,dt.$$

Datorită parametrizării temporale utilizate, calculul variaţiei efective a acţiunii de-a lungul liniei de univers $\Gamma(t)\subset\mathbb{R}^{f+1}$ revine la derivarea totală în raport cu

studiul acestui tip de ecuaţii, se numeşte "integrală completă" a unei ecuaţii cu derivate parţiale de ordinul I, o soluţie a ei care posedă tot atâtea constante arbitrare şi neaditive câte variabile independente figurează în ecuaţie. Cum sistemul fizic considerat posedă f grade de libertate, iar timpul apare principial ca o variabilă independentă, am fi tentaţi să spunem că ecuaţia Hamilton-Jacobi conţine (f+1)-constante arbitrare şi neaditive. Dar, deoarece funcţia necunoscută, acţiunea sistemului, apare în ecuaţie numai prin derivatele ei, una din cele (f+1) constante va apare în integrala completă ca o constantă aditivă, astfel încât, cea mai generală formă a unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi va fi

$$(5.1)\qquad S(x,t) = S\left(x^1,\ldots,x^f,t,\alpha_1,\ldots,\alpha_f\right) + S_0,$$

conţinând deci, numai f constante independente şi neaditive $\{\alpha_a\}_{a=\overline{1,f}}$. Importanţa în Mecanica Analitică a cunoaşterii unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi constă în aceea că permite imediat integrarea ecuaţiilor canonice de mişcare. Acest rezultat este riguros stabilit de către

Teorema lui Jacobi. Dacă se cunoaşte o integrală completă, de forma (5.1), a ecuaţiei Hamilton-Jacobi, atunci integralele ecuaţiilor canonice sunt:

$$(5.2)\qquad \text{a)}\quad \frac{\partial S}{\partial \alpha_a} = \beta^a \qquad \text{b)}\quad \frac{\partial S}{\partial x^a} = p_a \qquad , \text{ cu } a=\overline{1,f}$$

şi conţin 2f constante arbitrare $\{\alpha_a,\beta^a\}_{a=\overline{1,f}}$, care se determină concret, pentru fiecare mişcare analizată, din datele iniţiale.

Demonstraţie. Ideea constă în a demonstra că rezultatele (5.2) conduc în mod riguros la echivalenţa dintre integrarea ecuaţiei Hamilton-Jacobi şi integrarea ecuaţiilor Hamilton. Pentru aceasta, să derivăm total, în raport cu timpul, relaţia (5.2.a):

$$(5.3)\qquad \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \alpha_a} + \dot{x}^c \frac{\partial^2 S}{\partial x^c \partial \alpha_a} = 0.$$

Astfel, principiul acestei metode constă în diferenţierea relaţiei (4.1) în raport cu t şi exprimarea lagrangeianului, prin intermediul hamiltonianului sistemului (vezi (3.11)).Rezultă ecuaţia

$$(4.7)\qquad \frac{\partial S}{\partial x^a}dx^a + \frac{\partial S}{\partial t}dt = p_a dx^a - H(x^a,p_a,t)\,dt,$$

care se mai poate scrie

$$(4.8)\qquad \left(\frac{\partial S}{\partial x^a} - p_a\right)dx^a + \left(\frac{\partial S}{\partial t} + H(x^a,p_a,t)\right)dt = 0.$$

Având în vedere caracterul infinitezimal arbitrar şi independent, atât al configuraţiilor vecine, cât şi al momentelor la care acestea sunt surprinse, ecuaţia (4.8) conduce simultan la cele două ecuaţii fundamentale ale metodei Hamilton-Jacobi:

$$(4.9)\qquad \text{a)}\quad p_a = \frac{\partial S}{\partial x^a}$$

$$\text{b)}\quad H\left(x^a;\frac{\partial S}{\partial x^a};t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Ca o concluzie a acestui paragraf, atragem atenţia că ecuaţia Hamilton-Jacobi, după cum se observă şi din cele două metode de demonstrare a ei, are în ce priveşte dinamica sistemului fizic pentru care este formulată, un caracter foarte general, ea cuprinzând efectiv toate mişcările posibile "accesibile" sistemului. Determinarea uneia dintre mişcări se face prin aplicarea Teoremei Jacobi.

I.5. Teorema Jacobi

Chiar de la prima vedere a expresiei (4.6), sau (4.9.b), observăm că ecuaţia Hamilton-Jacobi este o ecuaţie neliniară, cu derivate parţiale de ordinul I, având drept funcţie necunoscută acţiunea sistemului.

După cum se cunoaşte din rezultatele matematice generale obţinute în

studiul acestui tip de ecuaţii, se numeşte "integrală completă" a unei ecuaţii cu derivate parţiale de ordinul I, o soluţie a ei care posedă tot atâtea constante arbitrare şi neaditive câte variabile independente figurează în ecuaţie. Cum sistemul fizic considerat posedă f grade de libertate, iar timpul apare principial ca o variabilă independentă, am fi tentaţi să spunem că ecuaţia Hamilton-Jacobi conţine (f+1)-constante arbitrare şi neaditive. Dar, deoarece funcţia necunoscută, acţiunea sistemului, apare în ecuaţie numai prin derivatele ei, una din cele (f+1) constante va apare în integrala completă ca o constantă aditivă, astfel încât, cea mai generală formă a unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi va fi

$$(5.1) \qquad S(x,t) = S\left(x^1,\ldots,x^f,t,\alpha_1,\ldots,\alpha_f\right) + S_0,$$

conţinând deci, numai f constante independente şi neaditive $\{\alpha_a\}_{a=\overline{1,f}}$.

Importanţa în Mecanica Analitică a cunoaşterii unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi constă în aceea că permite imediat integrarea ecuaţiilor canonice de mişcare. Acest rezultat este riguros stabilit de către

Teorema lui Jacobi. Dacă se cunoaşte o integrală completă, de forma (5.1), a ecuaţiei Hamilton-Jacobi, atunci integralele ecuaţiilor canonice sunt:

$$(5.2) \qquad \text{a)} \quad \frac{\partial S}{\partial \alpha_a} = \beta^a \qquad \text{, cu } a=\overline{1,f}$$

$$\text{b)} \quad \frac{\partial S}{\partial x^a} = p_a$$

şi conţin 2f constante arbitrare $\{\alpha_a,\beta^a\}_{a=\overline{1,f}}$, care se determină concret, pentru fiecare mişcare analizată, din datele iniţiale.

Demonstraţie. Ideea constă în a demonstra că rezultatele (5.2) conduc în mod riguros la echivalenţa dintre integrarea ecuaţiei Hamilton-Jacobi şi integrarea ecuaţiilor Hamilton. Pentru aceasta, să derivăm total, în raport cu timpul, relaţia (5.2.a):

$$(5.3) \qquad \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \alpha_a} + \dot{x}^c \frac{\partial^2 S}{\partial x^c \, \partial \alpha_a} = 0.$$

Derivând şi ecuaţia (4.9.b), parţial, în raport cu α_a, obţinem

$$(5.4) \qquad \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_a \partial t} + \frac{\partial H}{\partial \dfrac{\partial S}{\partial x^c}} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_a \partial x^c} = 0.$$

Efectuând diferenţa, membru cu membru, a ecuaţiilor (5.3), (5.4) şi având în vedere relaţia de definiţie (4.9.a) a impulsului generalizat, în formularea de acţiune, rezultă ecuaţia

$$(5.5) \qquad \left(\dot{x}^c - \frac{\partial H}{\partial p_c}\right) \cdot \frac{\partial^2 S}{\partial x^c \, \partial \alpha_a} = 0 \quad ; \quad a,c=\overline{1,f}.$$

Deoarece setul $\{\alpha_a\}_{a=\overline{1,f}}$ formează un sistem esenţial de constante, rezultă că

$$\det\left[\frac{\partial^2 S}{\partial x^c \, \partial \alpha_a}\right] \neq 0,$$

ceea ce face ca sistemul liniar şi omogen (5.5) să aibă numai soluţie banală, conducând astfel la primul grup al ecuaţiilor canonice, adică (3.12.a).

In continuare, să derivăm total în raport cu timpul relaţia (5.2.b) şi parţial, în raport cu coordonata generalizată x^a, ecuaţia Hamilton-Jacobi (4.9.b). Obţinem, pe rând, ecuaţiile:

$$(5.6) \qquad \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial x^a} + \dot{x}^c \frac{\partial^2 S}{\partial x^c \, \partial x^a} = \dot{p}_a$$

şi

$$(5.7) \qquad \frac{\partial^2 S}{\partial x^a \, \partial t} + \frac{\partial H}{\partial p_c} \frac{\partial^2 S}{\partial x^c \, \partial x^a} + \frac{\partial H}{\partial x^a} = 0.$$

Din diferenţa, membru cu membru, a celor două ecuaţii, având în vedere şi primul set (3.12.a) al ecuaţiilor Hamilton, rezultă imediat al doilea grup al ecuaţiilor canonice, adică (3.12.b), şi astfel teorema analizată este complet demonstrată.

BCU CLUJ LIBRARY

Concluzii şi observaţii

- Ecuaţia Hamilton-Jacobi, (4.6) sau (4.9.b), este ecuaţia fundamentală a Mecanicii Analitice, având grad general de aplicabilitate asupra tuturor sistemelor fizice cu număr finit de grade de libertate care acceptă formulare de acţiune.
- Expresia (5.1) reprezintă forma generală a unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi, pentru un sistem fizic cu f-grade de libertate, iar setul $\{\alpha_a\}_{a=\overline{1,f}}$ reprezintă sistemul esenţial al constantelor independente şi neaditive asociate integralei.
- Cunoaşterea unei integrale complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi permite, prin aplicarea teoremei lui Jacobi, adică prin intermediul relaţiilor (5.2), integrarea completă a ecuaţiilor Hamilton.
- Determinarea celor 2f constante $\{\alpha_a, \beta^a\}_{a=\overline{1,f}}$, astfel încât să fie asigurată unicitatea soluţiei ecuaţiilor canonice de mişcare, se face prin impunerea în rezultatul final, după aplicarea teoremei lui Jacobi, a condiţiilor iniţiale, formulate pentru problema concret analizată.

I.6. Mişcarea nerelativistă a punctului material liber

Conţinutul acestui ultim paragraf al prezentului capitol, deşi foarte simplu din punct de vedere matematic, este foarte important din două puncte de motive:

- pe de o parte, reprezintă cel mai simplu exemplu, exact integrabil, de aplicare a metodei Hamilton-Jacobi şi de separare a variabilelor prin identificarea, în acest caz, a tuturor coordonatelor ciclice,
- iar pe de altă parte, după cum vom vedea concret în capitolul IV, acest exemplu reprezintă sursa principală de inspiraţie în elaborarea metodei de justificare a celei mai generale ecuaţii din Mecanica Cuantică, anume, "ecuaţia de evoluţie a stărilor cuantice", bazată pe generalizarea formulării de acţiune (Hamilton-Jacobi) a Mecanicii Analitice.

BCU / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Analiza mişcării nerelativiste a punctului material liber, în spaţiul euclidian tridimensional $\mathbb{R}^3$, are la bază anularea tuturor forţelor exterioare, deci şi a celor provenite din potenţiale generalizate. In această situaţie, din forma expresiilor (2.23) şi (2.24), tragem concluzia că potenţialul vector $\vec{A}$ ar putea fi cel mult constant, iar potenţialul simplu W cel mult coerent, adică dependent numai de timp. In ambele situaţii, potenţialul generalizat (2.23) ar reprezenta o derivată totală în raport cu timpul, adăugată lagrangeianului sistemului uniparticulă considerat şi deci, după cum se cunoaşte, sau se poate demonstra imediat, nu afectează dinamica sistemului. Luând în considerare toate aceste aspecte, lagrangeianul sistemului, după cum se observă din (2.25), se reduce la expresia

$$(6.1) \qquad L = \frac{1}{2}m|\dot{x}|^2, \quad \text{unde} \quad |\dot{x}|^2 = \delta_{ij}\dot{x}^i\dot{x}^j,$$

din care, prin aplicarea relaţiei de definiţie (3.6), rezultă impulsurile generalizate (care în acest caz coincid cu componentele impulsului mecanic)

$$(6.2) \qquad p_i = m\dot{x}_i.$$

Utilizând (6.1) şi (6.2) în relaţia de definiţie (3.11) a funcţiei Hamilton, rezultă pentru aceasta expresia

$$(6.3) \qquad H = \frac{1}{2m}|p|^2, \quad \text{unde} \quad |p|^2 = \delta^{ij}p_ip_j,$$

care conduce, având în vedere ecuaţiile fundamentale ale formulării de acţiune (4.9), la forma concretă a ecuaţiei Hamilton-Jacobi

$$(6.4) \qquad \frac{1}{2m}\delta^{ik}\frac{\partial S}{\partial x^i}\cdot\frac{\partial S}{\partial x^k} + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Obţinerea unei integrale complete, pentru ecuaţia (6.4), este puternic favorizată de faptul că atât timpul t, cât şi coordonatele carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$ sunt coordonate ciclice, adică, din punct de vedere practic, sunt "deja separate". Prin urmare, vom căuta soluţia generală sub forma

$$(6.5) \qquad S(x,t) = \sum_{i=1}^{3} X_i(x^i) + T(t)$$

care, înlocuită în ecuaţia (6.4), o transformă în

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{dX_i}{dx^i}\right)^2. \tag{6.6}$$

Din faptul că toate variabilele dinamice $\{x^i,t\}_{i=\overline{1,3}}$ sunt independente rezultă următorul sistem de ecuaţii diferenţiale ordinare, de ordinul I, cu variabile separabile:

$$\text{a)}\quad \frac{dX_i}{dx^i} = \alpha_i$$

$$\text{b)}\quad \frac{dT}{dt} = -\frac{1}{2m}\sum_{i=1}^{3}(\alpha_i)^2, \tag{6.7}$$

prin integrarea căruia obţinem setul de funcţii $\{X_i,T\}_{i=\overline{1,3}}$

$$X_i(x^i) = \alpha_i x^i \quad \text{(fără sumare)}$$

$$T(t) = -\frac{1}{2m}\left(\sum_{i=1}^{3}\alpha_i^2\right)t, \tag{6.8}$$

care, înlocuite în (6.5), ne oferă integrala completă a ecuaţiei Hamilton-Jacobi (6.4) corespunzătoare sistemului analizat:

$$S(x^i,t;\alpha_i) = \alpha_i x^i - \frac{1}{2m}\left(\delta^{ik}\alpha_i\alpha_k\right)t \quad \text{(cu sumare)}. \tag{6.9}$$

In baza relaţiei (5.2.b) din teorema lui Jacobi, constantele $\{\alpha_i\}_{i=\overline{1,3}}$ sunt chiar impulsurile generalizate $\{p_i\}_{i=\overline{1,3}}$ şi atunci coeficientul coordonatei temporale din (6.9) are, concret, semnificaţia energiei totale, eminamente de natură cinetică, a punctului material. Prin aplicarea relaţiei (5.2.a) din teorema Jacobi, rezultă legea de mişcare a punctului material, anume

$$x^i = \beta^i + \frac{\alpha^i}{m}t \quad , \quad i=\overline{1,3}, \tag{6.10}$$

care evidenţiază, pentru constantele $\{\beta^i\}_{i=\overline{1,3}}$, rolul de coordonate ale poziţiei iniţiale, la $t=0$, şi reconfirmă semnificaţia fizică de componente carteziene ale impulsului particulei pentru constantele $\left\{\alpha^i = \delta^{ik}\alpha_k\right\}_{i,k=\overline{1,3}}$, adică

$$(6.11)\quad \beta^i = x_0^i \quad ; \quad \frac{\alpha^i}{m} = \frac{p^i}{m} = v^i \quad (i=\overline{1,3}).$$

In concluzie, metoda Hamilton-Jacobi aplicată mişcării nerelativiste a punctului material liber conduce la următoarele rezultate pentru integrala completă a acţiunii şi pentru legea de mişcare a particulei:

$$(6.12)\quad \text{a)} \qquad S(\vec{x},t) = \vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{|\vec{p}|^2}{2m}t$$

$$\text{b)} \qquad \vec{x} = \vec{x}_0 + \frac{\vec{p}}{m}t.$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL II

APARITIA FIZICII CUANTICE. PREMISE EXPERIMENTALE SI TEORETICE

In plin secol XIX şi sub unele aspecte chiar şi la începutul secolului XX, rafinamentul ştiinţific al fizicii acelor vremuri, denumită astăzi Fizica Clasică, era unanim recunoscut, iar perspectiva atingerii perfecţiunii în acest domeniu era considerată ca practic iminentă [47]:

> "Când am început studiile mele de fizică şi l-am întrebat pe respectatul meu profesor Philipp v. Jolly, cerându-i un sfat în legătură cu condiţiile şi perspectivele cercetărilor mele, el mi-a prezentat fizica drept o ştiinţă extrem de dezvoltată, aproape desăvârşită, care urmează curând să-şi primească forma definitivă şi stabilă, după ce a fost încununată, într-un anumit sens, prin descoperirea principiului conservării energiei. Fireşte, în anumite colţuri mai era posibil să observi sau să îndepărtezi un fir de praf..., dar sistemul în ansamblul său era destul de solid, iar fizica teoretică se apropie în mod vădit de acel grad de perfecţiune pe care geometria îl poseda de veacuri".

Dar dezvoltarea fizicii nu avea să se facă pe o cale dreaptă şi foarte puţini cercetători intuiau atunci că sub acel mărunt fir de praf se ascundea un întreg univers ce va zdruncina din temelii concepţiile şi reprezentările fundamentale ale gândirii ştiinţifice şi filozofice din acea perioadă.

Căutând să pătrundem ordinea cronologică a evenimentelor majore care au condus la apariţia fizicii cuantice, în acest capitol vom detalia ideile teoretice novatoare ce aveau să explice legile şi rezultatele experimentale obţinute în studiul unor sisteme fizice, a căror comportare era de neînţeles în cadrul fizicii clasice. Astfel, radiaţia termică şi legile radiaţiei corpului negru,

împreună cu teoria lui Planck bazată pe ipoteza cuantelor de energie, sunt detaliate în primele două paragrafe, iar efectul fotoelectric şi teoria lui Einstein asupra acestuia sunt prezentate în paragrafele II.3 şi II.4. Subiectul celui de al cincilea paragraf este reprezentat de studiul clasic al împrăştierii particulelor α pe nuclee masive (metodă extrem de ingenioasă, prima oară dezvoltată cu această ocazie şi care azi constituie un domeniu vast al fizicii moderne), care l-a condus pe Rutherford la formularea modelului planetar al atomului. Formula lui Balmer şi principiul de combinare enunţat de Ritz fac subiectul celui de al şaselea paragraf, iar în paragraful II.7 este analizată teoria lui Bohr asupra atomului de hidrogen, bazată pe celebrele sale postulate şi pe remarcabila relaţie Bohr de cuantificare. Invarianţii adiabatici ai mişcării şi expresia generalizată a relaţiei de cuantificare, împreună cu modelul atomic Bohr-Sommerfeld-Wilson, atât în variantă nerelativistă cât şi relativistă, fac subiectul paragrafelor II.8, II.9 şi II.10, iar efectul Compton şi teoria acestuia, bazată pe natura corpusculară a radiaţiei electromagnetice, sunt tratate în ultimele două paragrafe ale prezentului capitol.

II.1. Radiaţia termică. Legile radiaţiei corpului negru

Din punct de vedere experimental se poate stabili, relativ uşor, că există trei forme principale de propagare a căldurii şi anume prin conducţie, convecţie şi radiaţie. Făcând abstracţie de nivelul cunoştinţelor actuale, pentru a evidenţia contextul istoric în care operau conceptele şi reprezentările de care ne ocupăm în cele ce urmează, putem afirma că, în timp ce primele două moduri de propagare sunt direct intuitive, explicând transferul de căldură prin existenţa în substanţă a unor curenţi calorici circulând de la regiunile mai calde spre cele mai reci, al treilea mod de propagare are o natură deosebită, evidenţiind mai ales absenţa suportului material, în sens substanţial, al curentului caloric implicat în transferul relativ de căldură. Cu privire la acest mod de propagare, prima explicaţie calitativă, extrem de apropiată de cea corectă, care avea să vină după mai bine de o sută de ani, a fost dată de Isaac Newton care scria în "Problema 18" din [45] următoarele:

"Nu se comunică oare căldura încăperii calde prin intermediul vibraţiilor unui mediu mai subtil decât aerul, care, după ce a fost scos aerul, rămâne în vacuum? Acest mediu nu e acelaşi cu mediul în care se refractă şi reflectă lumina şi prin ale cărui vibraţii lumina comunică corpurilor căldură...? Iar corpurile calde nu comunică din căldura lor corpurilor vecine, mai reci, prin vibraţiile acestui mediu propagate de la ele la cele reci?"

Dar fizica acelor vremuri nu era suficient de dezvoltată pentru ca Newton să poată răspunde complet la aceste întrebări.

Prima lege calitativă referitoare la radiaţia termică a fost dată de Pierre Prévost în 1791:

Independent de mediul în care se găseşte, orice corp emite radiaţie termică, iar la echilibru termic, corpul absoarbe din exterior aceeaşi energie radiantă cu cea pe care a emite.

Câţiva ani mai târziu, în perioada 1801-1803, William Herschel constantă efectul termic al undelor "infraroşii", iar Theodore de Saussure şi Marcus-Augustus Pictet stabilesc experimental că razele radiaţiei termice se reflectă şi se refractă întocmai ca lumina, deci natura radiaţiei termice este aceeaşi cu natura luminii.

Pentru a surprinde bazele tratării teoretico-fenomenologice a radiaţiei termice, să definim în continuare mărimile fizice esenţiale, pe baza cărora Gustav Robert Kirchhoff a formulat, în 1859, prima lege cantitativă asupra acestei forme de propagare a căldurii. Să considerăm în acest sens, o incintă izotermă, de volum V, mărginită de pereţi complet reflectători, în interiorul căreia se introduce un corp C aflat la o temperatură T. Se constată că, după un interval de timp oarecare, energia medie primită de corp în unitatea de timp, devine egală cu energia radiaţiei emise de corp în unitatea de timp, stabilindu-se astfel un echilibru dinamic între corp şi radiaţia emisă de acesta, adică în interiorul incintei se obţine o radiaţie termică de echilibru caracterizată prin următoarele mărimi energetice fundamentale:

a) energia radiantă volumică $w(T)$ definită prin expresia

(1.1) $$W = \int w(T)dV = w(T)\cdot V$$

unde, W este energia totală a radiaţiei de echilibru din incintă, la temperatura T.

b) densitatea spectrală a energiei radiante volumice $w_\nu(T)$, definită prin relaţia

(1.2) $$w(T) = \int_0^\infty w_\nu(T)d\nu\,,$$

adică $dw = w_\nu(T)d\nu$ reprezintă energia radiantă volumică elementară în intervalul de frecvenţe ν, $\nu+d\nu$.

Dacă avem în vedere un element de suprafaţă

$$d\vec{\sigma} = \vec{n}\,d\sigma \quad , \quad |\vec{n}| = 1\,,$$

din spaţiul de radiaţie, putem caracteriza energia radiantă elementară dW, ce străbate $d\sigma$ în intervalul de timp dt şi intră în unghiul solid $d\Omega$, axat pe direcţia de versor $\vec{u}$, prin intermediul unei alte mărimi, luminanţa energetică L, definită prin relaţia

(1.3) $$dW = L(d\vec{\sigma}\cdot\vec{u})d\Omega\,dt = L\cos\theta\,d\sigma\,d\Omega\,dt \quad , \quad \vec{n}\cdot\vec{u} = \cos\theta\,.$$

Dar, radiaţia propagându-se cu viteza $\vec{c}=c\vec{u}$ şi având la echilibru o distribuţie spaţială izotropă, energia radiantă elementară dW se poate exprima şi în raport cu energia radiantă volumică, prin

(1.4) $$dW = wc(\vec{u}\cdot\vec{n})\,d\sigma\,\frac{d\Omega}{4\pi}\,dt = \frac{c}{4\pi}\,w\cos\theta\,d\sigma\,d\Omega dt.$$

Din (1.3) şi (1.4) rezultă relaţia de definiţie a luminanţei energetice în raport cu energia radiantă volumică

(1.5) $$L = \frac{c}{4\pi}\,w.$$

In mod cu totul analog definirii densităţii spectrale a energiei radiante volumice, putem defini densitatea spectrală a luminanţei energetice, prin intermediul expresiei

$$(1.6) \quad L(T) = \int_0^\infty L_\nu(T)d\nu$$

adică, $dL = L_\nu(T)d\nu$ reprezintă luminanţa energetică elementară în intervalul de frecvenţe ν, $\nu+d\nu$. Din (1.2), (1.5) şi (1.6) rezultă relaţia de proporţionalitate dintre densităţile spectrale ale luminanţei energetice şi energiei radiante volumice

$$(1.7) \quad L_\nu(T) = \frac{c}{4\pi} w_\nu(T).$$

Fie acum $d\vec{\Sigma} = \vec{n}\, d\Sigma$, $|\vec{n}| = 1$, un element de suprafaţă pe frontiera Γ a corpului C. In intervalul de frecvenţă ν, $\nu+d\nu$ şi intervalul de timp dt, asupra acestui element de suprafaţă va cădea sub unghiul solid $d\Omega$, axat pe direcţia de versor $\vec{u}$, cu $\vec{n}\cdot\vec{u} = \cos\theta$, energia radiantă elementară

$$(1.8) \quad dW_{(i)}(\nu,T) = L_\nu(T)(\vec{n}\cdot\vec{u})\, d\Sigma\, d\Omega\, dt\, d\nu = \\ = L_\nu(T)\cos\theta\, d\Sigma\, d\Omega\, dt\, d\nu.$$

In aceleaşi condiţii geometro-termodinamice, corpul va emite energia radiantă elementară

$$(1.9) \quad dW_{(e)}(\nu,T) = M_\nu(T)(\vec{n}\cdot\vec{u})\, d\Sigma\, d\Omega\, dt\, d\nu = \\ = M_\nu(T)\cos\theta\, d\Sigma\, d\Omega\, dt\, d\nu,$$

unde, de astă dată, M_ν este densitatea spectrală a emitanţei energetice, care depinde nu numai de frecvenţa ν şi temperatura T, ci şi de natura corpului C. Evident, emitanţa energetică $M(T)$ se exprimă în raport cu densitatea ei spectrală, prin integrala

(1.10) $M(T) = \int_0^\infty M_\nu(T)d\nu$.

In toate situaţiile reale, adică perfect realizabile experimental, corpul C absoarbe, din energia incidentă elementară $dW_{(i)}(\nu,T)$, numai fracţiunea $A_\nu(T)$, restul fracţiunii $1-A_\nu(T)$ din energia radiantă incidentă reflectând-o. "Coeficientul" $A_\nu(T)$ este denumit factor spectral de absorbţie şi, ca şi densitatea spectrală a emitanţei energetice, depinde de frecvenţa ν, temperatura T şi de natura corpului C. In acord cu legea lui Prévost, la echilibru termic, energia radiantă emisă este egală cu energia radiantă absorbită, adică

(1.11) $dW_{(e)}(\nu,T) = A_\nu(T)\, dW_{(i)}(\nu,T)$,

de unde rezultă, prin utilizarea relaţiilor (1.8) şi (1.9), expresia cantitativă a legii lui Kirchhoff

(1.12) $$\frac{M_\nu(T)}{A_\nu(T)} = L_\nu(T),$$

adică:

Raportul dintre densitatea spectrală a emitanţei energetice şi factorul spectral de absorbţie este egal cu densitatea spectrală a luminanţei energetice, care depinde de frecvenţa ν a radiţiei şi de temperatura T a suprafeţei corpului, dar este independent de natura acestuia.

Din (1.12) şi (1.7) deducem că, atât densitatea spectrală a luminenţei energetice, cât şi densitatea spectrală a energiei radiante volumice, sunt funcţii universale de frecvenţa ν şi temperatura T de echilibru a radiaţiei.

Inainte de a trece la definirea corpurilor absolut negre, putem profita de faptul că avem toate datele pentru calculul presiunii exercitate de radiaţia de echilibru asupra pereţilor perfect reflectători ai incintei. De acest rezultat vom avea nevoie la studiul termodinamic al radiaţiei de echilibru, din care vom deduce, pe considerente pur fenomenologice, legile radiaţiei corpului

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

negru, bineînţeles până la limita determinării explicite a funcţiei universale a lui Wien $F(\nu/T)$, ce va fi introdusă ulterior.

Fie $d\vec{\sigma} = \vec{n}\, d\sigma$ (cu $|\vec{n}| = 1$) un element de suprafaţă pe frontiera Γ a incintei. In unghiul solid $d\Omega$, axat pe direcţia de versor $\vec{u}$, "cade" în unitatea de timp energia radiantă elementară (1.3). Impulsul elementar asociat energiei radiante elementare incidente are expresia [40]

$$(1.13)\quad d\vec{p} = \frac{1}{c}\, dW\, \vec{u},$$

deoarece este propagat în direcţia versorului $\vec{u}$. Inlocuind (1.5) în (1.3) şi rezultatul obţinut în (1.13), avem pentru impulsul radiant elementar următoarea expresie

$$(1.14)\quad d\vec{p} = \frac{w}{4\pi}\, (\vec{u}\cdot\vec{n})\, d\Omega\, d\sigma\, dt\, \vec{u},$$

în care este evidenţiată energia radiantă volumică $w(T)$. Pereţii incintei fiind perfect reflectători, transferul de impuls efectuat în direcţia normalei $\vec{n}$ la suprafaţa $d\sigma$ va fi dat de relaţia

$$(1.15)\quad dp_n = 2(d\vec{p}\cdot\vec{n}) = \frac{w}{2\pi}\, (\vec{u}\cdot\vec{n})^2\, d\Omega\, d\sigma\, dt,$$

din care deducem imediat, prin integrare după toate direcţiile de incidenţă ale energiei radiante din unghiul solid 2π, expresia presiunii de radiaţie

$$(1.16)\quad P = \frac{dp_n}{d\sigma\, dt} = \frac{w}{2\pi} \int\limits_{(\Omega=2\pi)} (\vec{u}\cdot\vec{n})^2\, d\Omega.$$

Explicitând integrala din (1.16) prin intermediul coordonatelor sferice unghiulare (θ,φ), rezultă

$$(1.17)\quad P = \frac{w}{2\pi} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \cos^2\theta\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = w \int_0^1 x^2 dx\,, \quad x = \cos\theta$$

din care deducem forma presiunii de radiaţie exprimată în funcţie de energia radiantă volumică

(1.18) $P = \frac{1}{3}w(T)$.

Revenind la expresia cantitativă (1.12) a legii lui Kirchhoff, observăm că, în studiul radiaţiei termice, un rol deosebit îl joacă acele corpuri pentru care

(1.19) $A_\nu(T) = 1$,

adică factorul spectral de absorbţie este unitar pe tot domeniul spectral $\nu \in (0,\infty)$ şi pentru orice temperatură de echilibru $T \in (0,\infty)$. Dat fiind faptul că aceste corpuri absorb integral toate radiaţiile termice incidente, ele au primit denumirea de corpuri absolut negre. Din (1.19), (1.12) şi (1.7) rezultă

(1.20) $M_\nu(T) = L_\nu(T) = \frac{c}{4\pi} w_\nu(T)$,

adică, pentru corpurile absolut negre densitatea spectrală a emitenţei fiind egală cu cea a luminenţei energetice, şi proporţională cu cea a energiei radiante volumice, este de asemenea o funcţie universală şi, deci, toate corpurile absolut negre sunt complet echivalente în ce priveşte proprietăţile şi universalitatea radiaţiei de echilibru emise. Tocmai din acest motiv, în literatura de specialitate se vorbeşte despre corpul absolut negru, sau pe scurt, corpul negru şi nu despre forma la plural a acestei denumiri. Pe de altă parte, credem că este indicat să reamintim că toate corpurile reale se deosebesc esenţial de corpul negru prin următoarele două caracteristici:

a) posedă coeficienţi spectrali de absorbţie, reflexie şi transmisie nenuli,
b) posedă, cu excepţia corpurilor cenuşii (pentru care factorul spectral de absorbţie este independent de frecvenţa radiaţiei incidente) o aşa numită "emisie selectivă" a radiaţiei termice (în sensul dependenţei efective de frecvenţă a factorului spectral de absorbţie).

Rezultă imediat că, în cazul corpului negru avem de a face cu un model, adică cu un sistem fizic idealizat, de care ne putem apropia practic doar în mod asimptotic şi nu în mod exact.

In încheierea acestui paragraf să deducem, pe cale pur fenomenologică, legile radiaţiei corpului negru, evidenţiind prin aceasta şi

limita aplicabilităţii teoriilor clasice în studiul acestui sistem fizic. Deoarece avem de a face cu un sistem termodinamic la echilibru, putem aplica principiul I al termodinamicii sub forma

(1.21) $TdS = dW + PdV,$

în care, înlocuind energia internă W cu energia radiantă (1.1) şi presiunea P cu presiunea radiaţiei (1.18), cum $dW = Vdw + wdV$, obţinem

(1.22) $$dS = \frac{V}{T}\frac{dw}{dT}dT + \frac{4w}{3T}dV$$

şi, explicitând faptul că dS este o diferenţială totală exactă, rezultă pentru energia radiantă volumică următoarea ecuaţie diferenţială ordinară de ordinul I

(1.23) $$\frac{dw}{dT} = 4\frac{w}{T}$$

a cărei soluţie generală

(1.24) $w(T) = \sigma T^4$, $\sigma = const. > 0$

reprezintă expresia legii Stefan-Boltzmann:

Densitatea volumică de energie a radiaţiei corpului negru este proporţională cu puterea a patra a temperaturii absolute.

Această lege a fost stabilită experimental de către Joseph Stefan în 1879 şi dedusă teoretic, cinci ani mai târziu, de către Ludwig Boltzmann. Constanta σ are valoarea

$$\sigma = 7{,}57 \cdot 10^{-16}\ J/m^3K^4.$$

Inlocuind (1.24) în (1.22) rezultă

(1.25) $$S = S_0 + \frac{4}{3}\sigma T^3 V$$

şi impunând satisfacerea principiului trei al termodinamicii (teorema lui Nerst cu completarea adusă de Planck)

$$\lim_{T \to 0} S = 0,$$

obţinem expresia entropiei radiaţiei corpului negru

(1.26) $S = \frac{4}{3}\sigma T^3 V,$

din care deducem imediat ecuaţia adiabatelor în coordonate (T,V)

(1.27) $T^3V = const.$

In regim izentropic (adică de entropie constantă) volumul cavităţii depinde invers proporţional de temperatura absolută la puterea a treia.

Să presupunem acum că efectuăm o transformare adibatică a cavităţii de radiaţie, indusă de o transformare de similitudine de factor χ, adică la modificarea tuturor dimensiunilor liniare l prin înmulţire cu coeficientul real şi pozitiv χ. Atunci avem $l = \chi\, l_0$ şi $S = S_0$, l_0 şi S_0 fiind lungimea şi entropia iniţială, deci

(1.28) $V = \chi^3 V_0$ şi $T^3V = T_0^3 V_0$.

De aici rezultă pentru temperatură legea de transformare

(1.29) $T = \frac{T_0}{\chi},$

iar din

(1.30) $\lambda = \chi\, \lambda_0$ şi $\nu = \frac{c}{\lambda},$

unde $c = 3\cdot 10^8 \frac{m}{s}$ este o constantă universală, avem legea de transformare a frecvenţei

(1.31) $\nu = \frac{\nu_0}{\chi}.$

Utilizând (1.29) şi (1.31) în expresia

(1.32) $\sigma T^4 = \int_0^\infty w_\nu(T) d\nu$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

dedusă din (1.2) şi (1.24), obţinem legea de transformare a densităţii spectrale a energiei radiante volumice, $w_\nu(T) \equiv w_\nu(\nu,T)$, anume

$$(1.33)\quad w_\nu(\nu_0,T_0) = \chi^3\, w_\nu\left(\frac{\nu_0}{\chi},\frac{T_0}{\chi}\right).$$

Din faptul că ecuaţia funcţională (1.33) este valabilă oricare ar fi $\chi\in\mathbb{R}_+$, obţinem prin derivare după χ ecuaţia

$$(1.34)\quad 0 = 3\chi w_\nu\left(\frac{\nu_0}{\chi},\frac{T_0}{\chi}\right) - \nu_0\,\frac{\partial w_\nu}{\partial\frac{\nu_0}{\chi}} - T_0\,\frac{\partial w_\nu}{\partial\frac{T_0}{\chi}},$$

care se reduce, prin introducerea coordonatelor

$$(1.35)\quad x^1 = \frac{\nu_0}{\chi} = \nu \quad , \quad x^2 = \frac{T_0}{\chi} = T,$$

la următoarea ecuaţie neomogenă, liniară, cu derivate parţiale de ordinul I (vezi teoria funcţiilor omogene [63])

$$(1.36)\quad x^1\,\frac{\partial w_\nu}{\partial x^1} + x^2\,\frac{\partial w_\nu}{\partial x^2} = 3w_\nu(x^1,x^2).$$

Din sistemul caracteristicilor asociate

$$(1.37)\quad \frac{dx^1}{x^1} = \frac{dx^2}{x^2} = \frac{dw_\nu}{3w_\nu}$$

obţinem soluţia generală în reprezentare implicită

$$(1.38)\quad F\left(\frac{x^1}{x^2},\frac{w_\nu}{(x^1)^3}\right) = 0,$$

din care deducem forma explicită

$$(1.39)\quad w_\nu(x^1,x^2) = (x^1)^3\, f\left(\frac{x^1}{x^2}\right).$$

Având în vedere, în (1.39), semnificaţia (1.35) a coordonatelor (x^1,x^2), rezultă imediat legea funcţională a lui Wien (1893)

BUJAK CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(1.40) $w_\nu(T) = \nu^3 f(\nu/T)$,

adică

Densitatea spectrală a energiei radiante volumice este produsul dintre puterea a treia a frecvenţei cu funcţia universală a lui Wien, care la rândul ei depinde doar de raportul frecvenţei la temperatura de echilibru a radiaţiei termice.

Legea funcţională a lui Wien permite, evident, reobţinerea legii Stefan-Boltzmann, deoarece, efectuând în (1.40) schimbarea de variabilă $\nu = x\,T$ şi utilizând relaţia (1.2), obţinem

$$(1.41)\quad w(T) = \left[\int_0^\infty x^3 f(x)\,dx\right]\cdot T^4,$$

ceea ce arată că integrala improprie nu numai că trebuie să existe, dar trebuie să fie egală şi cu valoarea constantei σ.

Mai mult decât atât, legea fundamentală a lui Wien ne conduce la o altă lege a radiaţiei corpului negru, în deplin acord cu determinările experimentale, şi anume la aşa numita lege de deplasare a lui Wien. Pentru obţinerea expresiei cantitative a acestei legi să observăm că existenţa integralei improprii din (1.41) arată că

$$\lim_{x\to\infty} x^3 f(x) = 0$$

şi cum, prin definiţie, $f(x)\geq 0$ pe semiaxa $\mathbb{R}_+$, rezultă că densitatea spectrală a energiei radiante volumice $w_\nu(T)$ trebuie să aibă, la orice temperatură constantă, cel puţin un maxim. Astfel, din condiţia de extrem

$$\frac{dw_\nu}{d\nu} = 3f\left(\frac{\nu}{T}\right) + \frac{\nu}{T} f'\left(\frac{\nu}{T}\right) = 0,$$

care reprezintă de fapt o ecuaţie algebrică în $x = \nu/T$, rezultă că soluţia x_0 a ei dă, la o temperatură constantă, o valoare constantă a frecvenţei, notată ν_{max}, reprezentând frecvenţa la care distribuţia spectrală a energiei radiante

îşi atinge maximul.

Din relaţia

$$\frac{\nu_{max}}{T} = x_0 = const.,$$

exprimând frecvenţa ν_{max} prin intermediul lungimii de undă $\lambda_{max} = c/\nu_{max}$, obţinem forma cel mai des întâlnită a legii de deplasare a lui Wien

(1.42) $\lambda_{max} T = B,$

unde constanta B are valoarea $B = 2{,}89 \cdot 10^{-3}(mK)$, de asemenea determinată iniţial experimental, ca şi constanta σ.

Din cele prezentate reiese că analiza termodinamică a echilibrului radiaţiei termice cu pereţii incintei este insuficientă pentru determinarea, pe cale teoretică, a constantelor Wien şi Stefan-Boltzmann şi mai ales a formei explicite a funcţiei universale $f(\nu/T)$ a lui Wien.

Prima încercare de determinare pe cale teoretică, în cadrul electrodinamicii clasice, a densităţii spectrale a energiei volumice în cazul radiaţiei corpului negru, a fost efectuată de John William Strutt Rayleigh şi James Jeans care, considerând pereţii incintei ca o "plantaţie" de oscilatori ce emit radiaţie electromagnetică spre interiorul incintei şi primesc în acelaşi timp energie de la radiaţia electromagnetică din incintă, obţin pentru $w_\nu(T)$ expresia

(1.43) $$w_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E(\nu,T)\rangle = \frac{8\pi k}{c^3}\nu^3(T/\nu),$$

cunoscută şi sub denumirea de legea Rayleigh-Jeans. Comparând (1.43) cu (1.40) rezultă că Rayleigh şi Jeans obţin pentru funcţia Wien expresia

(1.44) $$f(x) = \frac{8\pi k}{c^3} \cdot \frac{1}{x}, \quad x = \frac{\nu}{T},$$

care, se observă imediat, conduce la divergenţa integralei improprii (1.41), deci la imposibilitatea definirii constantei σ şi mai mult, la inexistenţa unui punct de maxim, la temperatură constantă, a densităţii spectrale a energiei radiante volumice, deci la imposibilitatea satisfacerii legii de deplasare a lui

Wien. In plus, la orice temperatură $T \neq 0$, legea lui Rayleigh şi Jeans prevede o creştere pătratică continuă a distribuţiei spectrale a energiei radiante volumice, adică, pentru $\nu \to \infty$, conduce la o "catastrofă ultravioletă". Din ceea ce am spus până acum despre legea (1.43), s-ar putea crede că ea este o eroare ştiinţifică veritabilă, despre care nici nu ar mai avea sens să vorbim. De aceea dorim să menţionăm că, din punct de vedere clasic, ea este absolut corectă şi este verificată experimental, în spectrul de radiaţie al corpului negru, pentru frecvenţe mult mai mici decât ν_{max}. Ceea ce este interzis să presupunem despre legea Rayleigh-Jeans este valabilitatea ei pe întreg domeniul spectral.

Intr-o situaţie, practic "cu nimic mai fericită", se găseşte şi legea semiempirică dată de Wilhelm Carl Werner Wien în anul 1896

$$(1.45)\quad w_\nu(T) = C_1 \nu^3 e^{-C_2 \nu/T} \quad ; \quad f(x) = C_1 e^{-C_2 x} \quad ; \quad C_1,\ C_2 = const..$$

Aparent, constantele C_1 şi C_2 pot fi determinate din legea Stefan-Boltzmann şi din legea de deplasare. Adică, din:

$$\frac{C_1}{C_2^4} \int_0^\infty \xi^3 e^{-\xi}\, d\xi = \sigma$$

şi

$$\frac{\nu_{max}}{T} = \frac{3}{C_2}$$

rezultă

$$C_1 = \sigma \left(\frac{3B}{c}\right)^4$$

$$(1.46)\quad C_2 = \frac{3B}{c}.$$

Ar exista astfel două motive serioase în favoarea explicării radiaţiei corpului negru prin intermediul legii semiempirice (1.45) a lui Wien. Dar, dacă legea (1.45) nu a "preluat" nimic din ce este rău în legea Rayleigh-Jeans, ea nu a

putut prelua nimic nici din ce este bun în legea (1.43). Astfel, în cazul frecvenţelor mici, $\nu \ll \nu_{max}$, legea semiempirică prevede o extrem de slabă dependenţă de temperatură a densităţii spectrale a energiei radiante volumice (chiar o dependenţă invers proporţională cu temperatura !) şi o prea puternică dependenţă de frecvenţă, anume prin puterea a treia a acesteia.

Deşi legea (1.45) a lui Wien este verificată experimental în domeniul frecvenţelor mult mai mari decât frecvenţa ν_{max}, ea este drastic infirmată experimantal în restul domeniului spectral, deci, ca şi în cazul legii Rayleigh-Jeans, este "interzisă" postularea valabilităţii legii semiempirice a lui Wien pe întreg domeniul spectral al radiaţiei corpului negru.

Am insistat ceva mai mult, în finalul acestui paragraf, asupra caracterului vădit limitat al celor două legi, deoarece el a reprezentat o primă, dar profundă criză a fizicii teoretice, care se vedea complet dezarmată, la sfârşitul secolului XIX, în faţa problemei explicării unitare a radiaţiei corpului negru şi a găsirii formei explicite, cu deplină confirmare experimentală, a funcţiei universale $f(\nu/T)$ a lui Wien.

Era în mod cert nevoie de o idee nouă, fără analog în tot ce cunoscuse fizica clasică până atunci şi care, spre a-l parafraza pe Wolfgang Pauli, "trebuia să fie suficient de trăznită spre a fi adevărată". Si, la 1 decembrie 1900, această idee avea să vină...şi era într-adevăr "trăznită"...[67]

BCU IASI / CENTRU VECHI

II.2. Teoria lui Planck: ipoteza cuantelor de energie

"In istoria ştiinţei, au fost puţine evenimente care, în răstimpul scurt al unei generaţii, au avut astfel de consecinţe extraordinare ca descoperirea de către Planck a cuantei elementare de acţiune"

Niels Bohr[1]

Determinarea teoretică univocă a funcţiei universale a lui Wien a fost posibilă numai după ce Max Planck introduce în fizică ipoteza cuantelor de energie. Această ipoteză nu numai că a permis explicarea teoretică a legilor radiaţiei corpului negru, dar a revoluţionat fizica, conducând la apariţia unei noi ramuri a ei, nebănuită până atunci, anume fizica cuantică. Credem că este util, chiar şi numai pentru faptul că este tot mai rar prezentată în cărţile moderne de fizică, să reproducem, în cele ce urmează, pe cât posibil cu foarte puţine modificări, chiar calea urmată de Planck în formularea celebrei ipoteze, în descoperirea teoretică a constantei ce-i poartă numele şi în explicarea unitară a formei izotermelor intensităţii spectrale energetice a radiaţiei corpului negru. Astfel, după ce a început studiul în anul 1897 şi timp de trei ani a făcut o mulţime de încercări nereuşite, care aproape că îl dezamăgiseră complet, Max Planck are revelaţia soluţiei problemei; dacă modelăm radiaţia de echilibru printr-o "plantaţie" de oscilatori liniari armonici elementari, având la orice temperatură constantă o distribuţie continuă a frecvenţelor în tot spectrul $(0, \infty)$, vom impune ca energia

$$(2.1) \qquad Vw_{\nu}(T) = N(\nu)\langle E(\nu,T)\rangle$$

a tuturor celor $N(\nu)$ oscilatori din volumul cavităţii, cu frecvenţele în intervalul, $\nu, \nu+d\nu$ (fiecare având la temperatura T, energia medie $\langle E(\nu,T)\rangle$) să fie un multiplu întreg şi pozitiv al unei energii elementare ε, deocamdată nespecificată, adică

---

[1] *Wirkungsquanten und Naturbeschreibung-Die Naturweissenschaften*, 17, 1929, p. 483.

(2.2) $\quad Vw_{\nu}(T) = K(V,\nu,T)\,\varepsilon$.

Următorul pas deosebit de important, efectuat de Planck, în ce privește interpretarea mărimilor $N(\nu)$ și $K(V,\nu,T)$, pe care le vom desemna prin N și K pentru a simplifica notațiile, a constat în considerarea unui colectiv statistic de $N+K$ obiecte și în calculul probabilității termodinamice $W(N,K)$ prin estimarea configurațiilor distincte

$$(2.3) \qquad \Gamma = W(N,K) = \frac{(N+K)!}{N!\,K!},$$

din cele $(N+K)!$ configurații posibile. Astfel, pe baza formulei lui Boltzmann și a estimării logaritmului factorialului prin intermediul formulei lui Stirling ($N! = 2\pi\sqrt{N}\,N^N e^{-N}$), obținem, prin neglijarea factorului $2\pi\sqrt{N}$, pentru entropia celor $N(\nu)$ oscilatori, aflați în echilibru termodinamic la temperatura T, expresia

$$S = k[(N+K)\ln(N+K) - N\ln N - K\ln K],$$

care se poate scrie mai sugestiv, utilizând (2.1) și (2.2)

$$(2.4) \qquad S = kN\left[\left(1+\frac{<E>}{\varepsilon}\right)\ln\left(1+\frac{<E>}{\varepsilon}\right) - \frac{<E>}{\varepsilon}\ln\left(\frac{<E>}{\varepsilon}\right)\right].$$

Din (2.4) se poate calcula "termodinamic", prin intermediul relației

$$(2.5) \qquad \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V = \frac{1}{N}\cdot\frac{\partial S}{\partial <E>},$$

inversul temperaturii de echilibru, ceea ce ne conduce la rezultatul

$$\frac{1}{T} = \frac{k}{\varepsilon}\ln\left(1+\frac{\varepsilon}{<E>}\right),$$

adică la expresia energiei medii a unui oscilator liniar armonic elementar de frecvență ν, în echilibru termodinamic la temperatura T

$$(2.6) \qquad <E(\nu,T)> = \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1}.$$

Inlocuind acest rezultat în relaţia (2.1), împărţind prin volumul cavităţii şi comparând rezultatul astfel obţinut cu ecuaţia Rayleigh (1.43), rezultă expresia densităţii spectrale a energiei radiante volumice în raport cu cuanta de energie ε, ce urmează să o explicităm

$$(2.7) \qquad w_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \cdot \frac{\frac{\varepsilon}{\nu}}{e^{\frac{\varepsilon}{\nu}\cdot\frac{\nu}{kT}} - 1}.$$

Pentru ca energia spectrală volumică (2.7) să satisfacă legea lui Wien (1.40), se observă din (2.7), că este necesar şi suficient ca raportul dintre energia elementară ε şi frecvenţa ν să fie o constantă universală, notată de Planck cu h. In acest fel Max Planck obţine următoarele expresii pentru energia medie a oscilatorului elementar şi pentru densitatea spectrală a energiei radiante volumice a corpului negru:

$$(2.8) \qquad \text{a)} \qquad \langle E(\nu,T)\rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

$$\text{b)} \qquad w_\nu(T) = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Ajunşi aici, am dori să facem o scurtă dar interesantă observaţie. Analizând la nivelul cunoştinţelor actuale forma acestei demonstraţii dată de Planck, putem nota că el a lucrat direct la nivelul a ceea ce numim astăzi statistica cuantică de echilibru a gazului fotonic. Că lucrurile stau aşa ne-o demonstrează forma funcţiei $K(V,\nu,T)$ pe care o explicită din relaţia (2.2) prin înlocuirea lui ε cu $h\nu$ şi utilizarea relaţiei (2.8.b), adică

$$(2.9) \qquad K(V,\nu,T) = \frac{2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \cdot V\,\frac{4\pi\nu^2}{c^3}.$$

Inmulţind (2.9) cu $d\nu$ şi exprimând membrul stâng în raport cu pulsaţia

$\omega=2\pi\nu$ şi modulul vectorului de undă $|\vec{k}|=k=\frac{\omega}{c}$, rezultă

$$(2.10)\quad K(V,\nu,T)d\nu=\frac{2}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}\cdot\frac{Vd^3k}{(2\pi)^3}\quad;\quad d^3k=4\pi k^2dk\,,\ \hbar=\frac{h}{2\pi}.$$

In baza cunoştinţelor actuale, recunoaştem fiecărui termen din membrul drept al relaţiei (2.10) următoarele semnificaţii:

a) 2 - numărul stărilor de polarizare ale fotonilor reali,

b) $\left[e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right]^{-1}=f_{B-E}(\omega,T)$ - funcţia de distribuţie Bose-Einstein pentru fotoni

c) $\frac{Vd^3k}{(2\pi)^3}$ - numărul de stări cuantice accesibile în spaţiul μ al fazelor, fotonilor cu pulsaţia în intervalul ω, $\omega+d\omega$.

Astfel, $K(V,\nu,T)d\nu$ reprezintă numărul fotonilor cu frecvenţa în intervalul ν, $\nu+d\nu$, din volumul V al cavităţii de radiaţie, aflaţi în echilibru termodinamic la temperatura T. Dar, cu siguranţă toate acestea depăşeau cu mult prea mult nu numai puterea de înţelegere a lui Max Planck, în acei ani, ci şi spiritul întregii fizici de la începutul secolului XX. Oricum, în sfera ideilor, Max Planck a fost deosebit de aproape de ipoteza fotonilor, drept cuante ale câmpului electromagnetic, şi de punerea cel puţin a bazelor statisticii Bose-Einstein. Tocmai de aceea rămâne totuşi întrebarea:

Dar dacă Planck sesiza atunci toate aceste lucruri?...

Să revenim acum la subiectul principal al discuţiei noastre şi să dăm ipotezei lui Planck forma ei "tradiţională":

Oscilatorul nu poate avea orice energie, spectrul lui de energie fiind discret, iar intervalul energiilor consecutive este constant, adică:

(2.11) $E_n = E_0 + nh\nu$, cu $n=0,1,2,...$

Cu ajutorul acestei formulări a ipotezei lui Planck, şi considerând pentru repartiţia oscilatorului pe nivelele $\{E_n\}$ o distribuţie Maxwell-Boltzmann, obţinem, pentru energia medie a unui oscilator, expresia

$$(2.12)\quad \overline{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n \exp(-E_n/kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n/kT)} = E_0 + \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Deoarece energia de zero E_0 nu intervine în procesele de absorbţie şi emisie, ci numai tranziţiile de energie contează, putem considera

$$(2.13)\quad \langle E(\nu,T)\rangle = \overline{E} - E_0$$

şi obţinem, cum era de aşteptat, chiar expresia (2.8.a) prin intermediul căreia rezultă evident expresia (2.8.b) a energiei spectrale volumice a radiaţiei corpului negru.

Să trecem, în cele ce urmează, la studiul detaliat al teoriei lui Planck, bazată pe formula (2.8.b), evidenţiind mai ales gradul ei de concordanţă cu tot ce se ştia până atunci (1900) despre radiaţia corpului negru.

a) In primul rând, teoria lui Planck înglobează unitar legile Rayleigh-Jeans şi Wien (semiempirică) pe care le conţine drept cazuri particulare, asimptotice. Intr-adevăr, pentru

$$\frac{h\nu}{kT} \ll 1$$

legea de distribuţie (2.8.b) se reduce la legea Rayleigh-Jeans (1.43), iar pentru

$$\frac{h\nu}{kT} \gg 1$$

formula lui Planck (2.8.b) ia forma legii semiempirice (1.45) a lui Wien.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

b) Prin integrarea pe toată semiaxa pozitivă a frecvenţelor ν, formula energiei spectrale volumice, dată de Planck, ne oferă pentru densitatea volumică a energiei radiante, următoarea expresie

$$w(T) = \frac{8\pi k^4}{(ch)^3} \cdot T^4 \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \tag{2.14}$$

unde s-a utilizat substituţia

$$x = \frac{h\nu}{kT}.$$

Pentru calculul analitic al integralei Debye-Einstein

$$D(3) = \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \tag{2.15}$$

observăm mai întâi că avem

$$D(3) = \int_0^\infty x^3 e^{-x} \left(\sum_{n=0}^\infty e^{-nx} \right) dx = \sum_{n=1}^\infty \int_0^\infty x^3 e^{-nx}\, dx = \Gamma(4) \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} = 6 \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^4} \tag{2.16}$$

Seria lui $1/n^4$, reprezentând funcţia Riemann de argument 4, $\zeta(4)$, putem să o evaluăm pornind de la următoarele două dezvoltări echivalente ale funcţiei $(\sin x)/x$ [25, 58]:

(2.17)

a) $$\frac{\sin x}{x} = 1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} - \frac{x^6}{6!} + \ldots$$

b) $$\frac{\sin x}{x} = \left(1 - \frac{x^2}{\pi^2}\right)\left(1 - \frac{x^2}{2^2\pi^2}\right)\left(1 - \frac{x^2}{3^2\pi^2}\right)\ldots$$

Efectuând înmulţirile în (2.17.b), rezultă

$$\frac{\sin x}{x} = 1 - \frac{x^2}{\pi^2} \sum_{k=1}^\infty \frac{1}{k^2} + \frac{x^4}{\pi^4} \sum_{k=1}^\infty \sum_{n=k+1}^\infty \frac{1}{k^2 n^2} + \ldots \tag{2.18}$$

astfel încât, identificând (2.18) cu (2.17.a), obţinem:

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(2.19)

a) $$\frac{1}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^2}=\frac{1}{6}$$

b) $$\frac{1}{2\pi^4}\sum_{k,n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{k^2n^2}\right)_{k\neq n}=\frac{1}{120}.$$

Prin ridicarea la pătrat a rezultatului (2.19.a), avem

$$\frac{1}{\pi^4}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^4}=\frac{1}{36}-\frac{1}{\pi^4}\sum_{k,n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{k^2n^2}\right)_{k\neq n},$$

din care rămâne, folosind (2.19.b)

(2.20) $$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^4}=\frac{\pi^4}{90}.$$

Inlocuind (2.20) în (2.16) rezultă pentru integrala Debye-Einstein valoarea

(2.21) $$D(3)=\frac{\pi^4}{15},$$

cu ajutorul căreia expresia (2.14) a energiei radiante volumice capătă forma concretă

(2.22) $$w(T)=\frac{8\pi^5k^4}{15c^3h^3}\cdot T^4,$$

care, pe lângă ceea ce ştim din legea Stefan-Boltzmann, dezvăluie "natura compozită" a constantei σ

(2.23) $$\sigma=\frac{8\pi^5k^4}{15c^3h^3}$$

în raport cu constantele Boltzmann şi Planck şi, deloc intuitiv la nivelul studiului fenomenologic, în raport cu constanta vitezei luminii. Pe seama relaţiei (2.23), în acord cu ceea ce ştim astăzi despre rolul constantelor fundamentale c, h, k şi G, putem afirma imediat că radiaţia termică este o proprietate universală a sistemelor fizice ce

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

alcătuiesc colective statistice (intervine k), având o origine cuantic-electrodinamică egal ponderată (h şi c sunt ambele la aceeaşi putere,3) şi fără legătură directă cu interacţiunea gravitaţională.

c) Să considerăm acum expresia energiei radiante volumice corespunzătoare frecvenţelor din intervalul ν, $\nu+d\nu$, adică

$$dw(\nu,T)=\frac{8\pi h}{c^3}\,\frac{\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}.$$

Introducând în această relaţie, în locul frecvenţei ν, lungimea de undă $\lambda=c/\nu$, obţinem

$$dw=w_\lambda(T)\,d\lambda=\frac{8\pi hc/\lambda^5}{\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right)-1}\,d\lambda,$$

deci, în raport cu lungimea de undă, energia spectrală volumică se exprimă prin relaţia

(2.24) $$w_\lambda(T)=\frac{8\pi hc/\lambda^5}{\exp\left(\frac{hc}{kT\lambda}\right)-1}.$$

Utilizând substituţia

(2.25) $$x=\frac{hc}{kT}\cdot\frac{1}{\lambda}$$

impunem funcţiei spectrale $w_\lambda(T)$ condiţia de extremum

$$\left[\frac{d}{dx}w_\lambda(T)\right]_{x_0}=0,$$

ceea ce ne conduce după un calcul scurt la ecuaţia transcendentă

(2.26) $$5-5e^{-x_0}-x_0=0.$$

Cum pentru $x_0=5$ eroarea absolută în evaluarea rădăcinii este

$$5e^{-5} \cong 0{,}0337$$

putem considera x_0 suficient de aproape de valoarea 5, luând

(2.27) $$x_0 = 5 - \zeta \quad , \quad |\zeta| < 1 ,$$

ceea ce aduce ecuaţia (2.26) la forma ei de primă iteraţie

$$5 - 5e^{-5}\, e^{\zeta} - (5 - \zeta) = 0 ,$$

adică

(2.28) $$(1 - 5e^{-5})\zeta = 5e^{-5} ,$$

de unde rezultă $\zeta \cong 0{,}03486$, într-adevăr <1 şi deci pentru x_0 din (2.27), obţinem

(2.29) $$x_0 \cong 4{,}965 .$$

Având în vedere (2.29) şi substituţia (2.25), în care $\lambda = \lambda_{max}$, rezultă forma concretă a legii de deplasare a lui Wien:

(2.30) $$\lambda_{max} \cdot T = \frac{hc/k}{4{,}965}$$

care evidenţiază "natura compozită" a constantei lui Wien

(2.31) $$B = \frac{hc/k}{4{,}965} .$$

Un comentariu analog celui efectuat pe seama constantei Stefan-Boltzmann ne arată că, în cazul constantei Wien, cele trei constante fundamentale intervin toate la aceeaşi putere, adică procesele cuantice electrodinamice şi statistice joacă roluri de pondere egală în stabilirea proprietăţilor maximului de radianţă al corpului negru. Aceasta este explicaţia fundamentală a imposibilităţii determinării clasice, teoretice sau semiempirice, a formei densităţii spectrale a energiei volumice în vecinătatea maximului de radianţă.

In ce priveşte valoarea constantei Planck, aceasta se determină, împreună cu constanta Boltzmann, din relaţiile (2.23) şi (2.31) în raport cu constantele σ şi B (bineînţeles şi în raport cu c) cunoscute experimental cu destulă precizie, obţinându-se

BCU IAŞI - BIBLIOTECA UNIVERSITY LIBRARY

$h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ $(J \cdot s)$ şi $k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ (J/K).

După cum vom vedea la studiul formei generalizate a relaţiei Bohr de cuantificare (paragraful 8), constanta lui Planck nu numai că are dimensiunea unei acţiuni, dar reprezintă efectiv cuanta elementară de acţiune.

II.3. Efectul fotoelectric

In acord cu datele considerate în Istoria Fizicii ca având atestare oficială, efectul fotoelectric (numit extern după descoperirea efectului fotoelectric intern) a fost descoperit, oarecum accidental, de către Heinrich Rudolf Hertz în anul 1887, atunci când a observat că, sub acţiunea unei radiaţii ultraviolete, tensiunea electrică necesară amorsării unei scântei, între eclatorii unei bobine transformatoare, este în mod cert mai mică decât tensiunea necesară amorsării în lipsa acţiunii radiaţiei.

Un studiu experimental mai amănunţit asupra acestui fenomen, este iniţiat aproape simultan, în anul 1888, de către Wilhelm Hallwachs şi Alexander Grigorevici Stoletov, care ajung la următoarele concluzii:

- *sub influienţa radiaţiei electromagnetice de frecvenţă suficient de ridicată, suprafeţele metalice emit sarcini electrice negative*
- *emisia de sarcini electrice negative încetează dacă frecvenţa radiaţiei electromagnetice incidente este mai mică decât o anumită valoare* ν_0 *numită frecvenţă de prag, care este dependentă de structura şi starea suprafeţei metalice iradiate*
- *în cazul îndeplinirii condiţiei de prag,* $\nu > \nu_0$*, intensitatea curentului electric de radiaţie care circulă printr-o celulă fotoelectrică, este riguros proporţională cu intensitatea radiaţiei electromagnetice absorbite de materialul fotocatodului (Legea lui Stoletov).*

In anul 1899, Philipp Eduard Anton von Lenard stabileşte cu certitudine că purtătorii de sarcină electrică care formează foto-curentul sunt

electronii, iar în 1902 dă cea mai importantă lege, din acea perioadă, a efectului fotoelectric:

- *energia electronului emis este independentă de intensitatea radiaţiei electromagnetice care-l eliberează, depinzând doar de frecvenţa acestuia.*

O serie de alte cercetări experimentale au stabilit încă un rezultat remarcabil, pe lângă legea lui Lenard, şi anume că

- *la scara unor durate macroscopice* $\Delta t \geq 10^{-6}$sec., *efectul fotoelectric este practic instantaneu, adică timpul scurs între începerea iradierii şi apariţia fotocurentului este practic zero.*

Pentru a întregi imaginea oferită de cercetările experimentale asupra efectului fotoelectric, vom prezenta succint, chiar cu riscul de a anticipa puţin conţinutul paragrafului următor, rezultatele obţinute de Robert Andrews Millikan în perioada 1914-1917. Astfel, iradiind o celulă fotoelectrică cu radiaţie electromagnetică de frecvenţă constantă, mai mare decât ν_0, de diferite fluxuri, controlabile experimental, Millikan obţine pentru familia de caracteristici curent-tensiune forma din figura 3.1, care reconfirmă legea lui Stoletov şi arată în plus că valoarea potenţialului de tăiere $-V_m$, la o frecvenţă dată, este independentă de fluxul radiaţiei electromagnetice incidente. Deoarece $-eV_m$ reprezintă lucrul mecanic al forţei electrice de frânare, care produce scăderea energiei cinetice a electronului emis de la valoarea maximă E_{CM}, la valoarea zero, adică o variaţie $\Delta E_c = -E_{CM}$, rezultă în baza legii variaţiei energiei cinetice, ecuaţia

$$(3.1) \qquad E_{CM} = \frac{1}{2} m v_M^2 = eV_M,$$

care, având în vedere independenţa potenţialului de tăiere de intensitatea radiaţiei incidente, exprimă exact legea lui Lenard.

Menţinând constantă intensitatea radiaţiei incidente şi variind în mod convenabil frecvenţa acesteia, Millikan obţine forma caracteristicilor curent-tensiune ale celulei fotoelectrice din figura 3.2, care evidenţiază creşterea cu

frecvenţa radiaţiei incidente atât a fotocurentului de saturaţie cât şi, mai ales, a valorii absolute V_m, a potenţialului de tăiere. Urmărind în mod special dependenţa de frecvenţa radiaţiei incidente a valorii absolute a potenţialului de tăiere, pentru fotocatozi confecţionaţi din diferite materiale (cu frecvenţa de prag în domeniul accesibil experimental la acea dată), Millikan obţine familia de caracteristici din figura 3.3, care conduc la cea mai importantă lege cantitativă a efectului fotoelectric:

- *energia cinetică maximă a electronilor emişi de catod creşte riguros liniar cu frecvenţa* $\nu > \nu_{0i}$ *a radiaţiei incidenta, adică*

(3.2) $$\frac{1}{2}mv_{Mi}^2 = eV_{mi} = A\nu - W_{0i}.$$

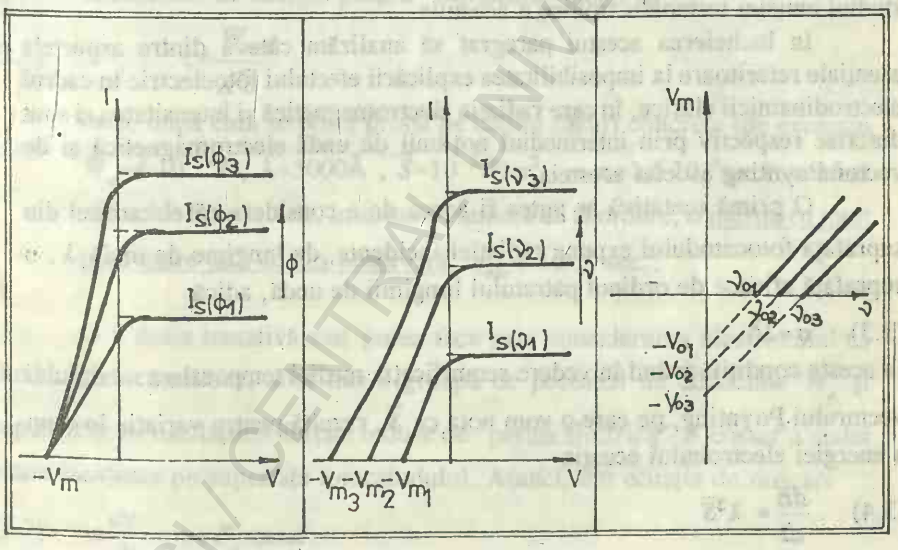


Fig. 3.1 Fig. 3.2 Fig.3.3

Măsurătorile efectuate de Millikan asupra pantei tuturor caracteristicilor $\{eV_{mi}(\nu)\}$ au scos în evidenţă, cu o eroare relativă sub 1%, că aceasta este

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

constantă pentru toate caracteristicile şi, mai mult, că valoarea ei A coincide, în limita aceleiaşi erori de sub 1%, cu constanta lui Planck h. In ce priveşte semnificaţia fizică a valorilor $\{W_{oi}\}$, obţinute grafic pentru $\nu=0$ prin extrapolarea caracteristicilor $\{eV_{mi}(\nu)\}$ în regiunea $\nu \in [0, \nu_{oi}]$, Millikan arată că acestea, adică W_{oi}, sunt egale cu valorile lucrului mecanic de extracţie specific fiecărui material în parte, din care a fost construit fotocatodul utilizat în trasarea respectivei caracteristici. Măsurători ulterioare au stabilit că lucrul mecanic de extracţie W_o, evaluat din studiul efectului fotoelectric asupra unui fotocatod dat, coincide practic, în limita unei erori relative de sub 3%, cu valoarea lucrului mecanic de extracţie, evaluat pentru acelaşi fotocatod din studiul emisiei termoelectronice a acestuia.

In încheierea acestui paragraf să analizăm câteva dintre aspectele esenţiale referitoare la imposibilitatea explicării efectului fotoelectric în cadrul electrodinamicii clasice, în care radiaţia electromagnetică şi intensitatea ei sunt descrise respectiv prin intermediul noţiunii de undă electromagnetică şi de vector Poynting asociat acesteia.

O primă tentativă ar putea fi aceea de a considera că electronul din suprafaţa fotocatodului expune radiaţiei incidente, de lungime de undă λ, o suprafaţă eficace de ordinul pătratului lungimii de undă, adică

(3.3) $\sigma \simeq \lambda^2$.

In aceste condiţii, având în vedere semnificaţia mediei temporale a modulului vectorului Poynting, pe care o vom nota cu $\overline{S}$, rezultă pentru variaţia în timp a energiei electronului ecuaţia

(3.4) $$\frac{dE}{dt} \simeq \lambda^2 \overline{S}$$

care are soluţia generală

(3.5) $E = E_o + \lambda^2 \overline{S} t$.

Forma soluţiei (3.5) conduce direct la abandonarea acestei tentative din următoarele motive:

a) este violată legea de existenţă a pragului roşu al efectului fotoelectric la o intensitate dată $\bar{S}\neq 0$ a radiaţiei incidente şi la orice lungime de undă a acesteia, energia electronului devine mai devreme sau mai târziu egală cu valoarea energiei de extracţie, ceea ce-i va permite părăsirea suprafeţei fotocatodului;

b) este violată legea lui Lenard prin faptul că în orice moment t energia electronului este dependentă de intensitatea radiaţiei, fiind direct proporţională cu aceasta;

c) este violată legea dependenţei liniare de frecvenţă a energiei electronului emis;

d) considerând la $t=0$, $E=-W_o$, rezultă pentru durata necesară acumulării de energie pentru "expulzare" valoarea

$$\tau=\frac{W_o}{\lambda^2\bar{S}} \tag{3.6}$$

care, după cum se poate proba pe câteva cazuri concrete (de exemplu $W_o=4\cdot10^{-19}J$, $\lambda=5000Å$, $\bar{S}=10^{-3}W/m^2$ $\Rightarrow$ $\tau=1{,}6\cdot10^{-3}$sec.), conferă efectului fotoelectric, în această manieră de abordare, o inerţie cu mult prea mare faţă de cea observată, $\tau_{obs}< 10^{-10}$ sec..

O a doua tentativă s-ar putea face prin considerarea electronului ca fiind iniţial cuasiliber, aflat într-o groapă de potenţial de adâncime W_o şi supus ulterior oscilaţiilor forţate induse de "partea electrică" $\mathscr{E}_o\cos\omega t$ a undei plane incidente pe suprafaţa fotocatodului. Atunci, din ecuaţia de mişcare

$$m\frac{dv}{dt} = -e\mathscr{E}_o\cos\omega t \tag{3.7}$$

rezultă pentru viteză expresia

$$v = -\frac{e\mathscr{E}_o}{m\omega}\sin\omega t, \tag{3.8}$$

cu ajutorul căreia calculăm media în timp a energiei cinetice câştigate de

electron în urma interacţiunii cu unda incidentă

$$(3.9)\quad \overline{E_c} = \frac{e^2 \mathcal{E}_o^2}{4m\omega^2}.$$

Exprimând $\mathcal{E}_o^2$ în raport cu valoarea medie a modulului vectorului Poynting

$$(3.10)\quad \mathcal{E}_o^2 = 2\mu_o c\overline{S}$$

rezultă pentru energia cinetică medie, preluată exclusiv de la radiaţie, expresia

$$(3.11)\quad \overline{E}_c = \frac{\mu_o c e^2}{2m\omega^2}\,\overline{S} = \frac{\mu_o e^2}{8\pi^2 mc}\,\lambda^2\overline{S}.$$

Aparent, această metodă de abordare ar rezolva problema inerţiei foarte mici a efectului fotoelectric deoarece energia medie (3.11) ar deveni semnificativă după numai câteva perioade de oscilaţie, ceea ce ar însemna că, în ipoteza

$$(3.12)\quad E = \overline{E}_c - W_o \geq 0$$

electronul ar fi expulzat cam în cadrul aceleaşi durate care, la o frecvenţă suficient de ridicată, ar fi sub valoarea $\tau_o = 10^{-10}$ sec.. Însă, forma explicită a dependenţei energiei cinetice medii (3.11) de lungimea de undă λ şi de intensitatea $\overline{S}$ a radiaţiei electromagnetice incidente impune, ca şi în cazul precedent, abandonarea acestei tentative fie şi numai din motivul că expresia (3.12) conduce la rezultatul

$$\lambda \geq \left[\frac{8\pi^2 mc}{\mu_o e^2 \overline{S}} W_o\right]^{1/2}$$

care reprezintă, la o intensitate $\overline{S}$ dată, un prag violet al efectului, în locul pragului roşu observat experimental.

Din cele spuse până acum se poate trage următoarea concluzie: oricât de perfecţionat ar fi, în cadrul fizicii clasice, un model care ar încerca să explice efectul fotoelectric, acesta va eşua indubitabil, deoarece, în acord cu electrodinamica clasică, electronul va prelua de la radiaţie o energie proporţională cu intensitatea $\overline{S}$ a acesteia şi nicidecum doar cu frecvenţa ei,

BCU "MIHAI EMINESCU" IAŞI LIBRARY

violând astfel atât legea lui Lenard cât şi legea cantitativă (3.2) a efectului fotoelectric. Mai mult decât atât, nerespectarea de către modelele clasice a legii (3.2) va conduce la imposibilitatea explicării prezenţei pragului roşu, care este cuprins în legea (3.2), prin impunerea condiţiei ca energia cinetică maximă a electronului emis să fie pozitiv definită

$$A_\nu - W_o \geq 0$$

adică

$$\nu \geq \nu_o = \frac{W_o}{A} = \frac{W_o}{h}$$

unde, în ultima egalitate, am folosit rezultatele măsurătorilor efectuate de Millikan care, confirmând $A=h$, verifică în mod strălucit teoria lui Einstein asupra efectului fotoelectric, bazată pe ipoteza "cuantelor de lumină", de care ne vom ocupa în paragraful ce urmează.

II.4. Cuantele de lumină (fotonii) şi teoria lui Einstein asupra efectului fotoelectric

"Ipoteza lui Einstein părea cel puţin îndrăzneaţă, ca să nu spun nesăbuită"
Robert Andrews Millikan

Timp de câţiva ani, după ce Max Planck, la 14 Decembrie 1900, a expus teoria sa în faţa Societăţii Germane de Fizică, ipoteza cuantelor de energie continua să fie privită cu foarte mari rezerve. Tabloul fizicii clasice, incapabil să accepte variaţia discretă a energiei, stăpânea într-o aşa măsură modul de gândire al fizicienilor, că însuşi Planck era foarte sceptic cu propria sa descoperire şi a mai încercat, un timp, să rezolve problema descrierii teoretice a radiaţiei corpului negru fără a se folosi de "neobişnuita" sa ipoteză. Dar iată că în anul 1905, un tânăr de 26 de ani, pe nume Albert Einstein, obligă fizica acelor vremuri să mai facă un pas hotărâtor pe calea dezvoltării teoriei cuantelor. Generalizând valabilitatea ipotezei lui Planck la însăşi structura câmpului electromagnetic, Einstein formulează ipoteza "cuantelor de

lumină", denumite ulterior de către Lewis, în 1916, fotoni:

Radiaţia electromagnetică de orice frecvenţă ν este un flux de cuante luminoase, fiecare în parte transportând energia $\varepsilon = h\nu$.

Deşi este fundamentată pe aceeaşi relaţie matematică, $\varepsilon = h\nu$, ca şi ipoteza lui Planck, ipoteza fotonilor este cu mult mai radicală, deoarece, prin ea Einstein introduce în fizică ideea cuantificării câmpului electromagnetic, care avea să fie dezvoltată teoretic 22 de ani mai târziu de către Paul Adrien Maurice Dirac (1927) şi deplin clarificată de către Enrico Fermi (1932) şi K. Bleuler şi S.N. Gupta în 1950. Este uşor să înţelegem de ce ipoteza lui Einstein a avut un impact mult mai violent decât ipoteza lui Planck, nu numai că era de aceeaşi natură cu ipoteza cuantelor de energie, dar la nivelul anilor 1905 era în contradicţie şi cu cea mai bună şi minuţios verificată teorie a fizicii clasice, anume teoria ondulatorie a luminii, readucând în arenă, dar într-o haină eminamente nouă, teoria lui Newton asupra naturii corpusculare a luminii, despre care exista convingerea că fusese invalidată pentru totdeauna.

Prin aplicarea ipotezei cuantelor de lumină, Einstein formulează într-un singur rând (sub aspectul ecuaţiilor utilizate)

$$(4.1) \qquad h\nu = \frac{1}{2} m v_M^2 + W_o$$

teoria elementară a efectului fotoelectric, explicând dintr-o dată, sub aspect global semicantitativ, toate legile acestuia. Prin interpretarea fizică a relaţiei (4.1) teoria fotonică a lui Einstein explică mecanismul efectului fotoelectric în felul următor:

Cuanta electromagnetică incidentă, de energie $\varepsilon = h\nu$, interacţionează direct (local) cu un electron (din suprafaţa metalului iradiat) care preluând de la cuantă întreaga-i energie se va putea expulza din metal cu o energie cinetică maximă $\frac{1}{2} m v_M^2$ după ce a efectuat lucrul mecanic de extracţie W_o. Astfel, pe baza ipotezei fotonice, cea mai importantă lege cantitativă a efectului fotoelectric capătă cea mai naturală

explicaţie: energia cinetică maximă a electronului emis nu are cum să depindă de intensitatea radiaţiei electromagnetice, deoarece electronul va fi expulzat de la prima "ciocnire" (şi singura necesară) cu unul dintre fotonii incidenţi, dacă energia acestuia este mai mare decât lucrul mecanic de extracţie. La ieşirea din suprafaţa fotocatodului, electronului îi va rămâne energia cinetică

(4.2) $$E_{CM} = h\nu - W_o$$

care este constant şi depinde liniar de frecvenţa radiaţiei. Din cele spuse mai sus, legea lui Lenard nici nu mai are nevoie de explicaţie, aceasta fiind mai mult decât cuprinsă în relaţia (4.2). Deasemenea, prezenţa pragului roşu a efectului fotoelectric rezultă imediat din ecuaţia (4.2) deoarece energia cinetică este totdeauna pozitiv definită şi deci, pentru ca efectul să aibă loc, trebuie ca frecvenţa fotonului să fie mai mare, sau, în cazul limită, egală cu valoarea de prag

(4.3) $$\nu_o = \frac{W_o}{h}.$$

Cu alte cuvinte, oricât de intensă ar fi radiaţia electromagnetică incidentă, adică oricât de mulţi fotoni cu frecvenţa $\nu<\nu_o$ ar traversa în unitatea de timp unitatea de suprafaţă a fotocatodului, nici unul dintre ei, prin interacţiune directă cu electronul, nu-i va putea da acestuia energia necesară expulzării; rând pe rând, după fiecare ciocnire cu câte un foton de energie $h\nu<W_o$, electronul va rămâne în suprafaţa iradiată. Printr-un raţionament analog, dar în cazul îndeplinirii condiţiei de prag, teoria lui Einstein explică, în deplină concordanţă cu verificările experimentale, legea lui Stoletov:

numărul electronilor expulzaţi în unitatea de timp din unitatea de suprafaţă a fotocatodului va fi cu atât mai mare cu cât numărul fotonilor incidenţi pe unitatea de suprafaţă şi în unitatea de timp va fi mai mare, deci cu cât intensitatea radiaţiei electromagnetice incidente este mai mare.

In fine, la scara duratelor macroscopice $\tau>10^{-6}$ sec., a unui decalaj temporal

între momentul începerii iradierii şi momentul apariţiei curentului fotoelectric se explică în cadrul teoriei date de Einstein prin faptul că interacţiunea fotonului cu electronul ce va fi expulzat se face brusc, dintr-odată, adică din punct de vedere fenomenologic timpul de interacţiune este practic zero.

Datorită caracterului deosebit de simplu şi mai ales datorită manierii corecte şi foarte directe prin care explica toate legile unuia din "efectele enigmă" din fizica începutului de secol, teoria fotonică a lui Einstein se impune în scurt timp, devenind alături de teoria lui Planck o a doua cărare spre teoria cuantică modernă.

II.5. Difuzia Rutherford. Modelul planetar al atomului

"Dacă într-un cataclism, întreaga cunoaştere ştiinţifică ar fi distrusă şi ar fi transmisă generaţiilor următoare numai o frază, ce enunţ ar conţine cea mai multă informaţie în cele mai puţine cuvinte? Credem că aceasta este ipoteza atomistă...conform căreia toate lucrurile sunt făcute din atomi-mici particule care se mişcă continuu, atrăgându-se una pe alta când sunt la mică distanţă, respingându-se când sunt înghesuite una într-alta".

Richard P. Feynman[2]

După cum am văzut în paragrafele anterioare, cele două ipoteze, a cuantelor de energie şi a cuantelor de lumină, au jucat un rol hotărâtor în apariţia fizicii cuantice prin modernizarea, până la radicalizare cognitivă, a două dintre noţiunile fundamentale ale fizicii clasice: energia şi radiaţia electromagnetică.

---

[2] *Fizica Modernă*, Vol. I, *Ed. Tehnică*, Bucureşti, 1969, p.21

BCU Cluj / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Este interesant de observat că deşi ipoteza lui Planck susţinea clar existenţa spectrului discret de valori ale energiei oscilatorului liniar, privit drept constituent elementar al substanţei pereţilor cavităţii de radiaţie, nimeni până la Nilels Bohr, adică până în 1913, nu s-a găsit să extindă această proprietate asupra celui mai cunoscut, la acea vreme, constituent elementar al substanţei: **atomul**.

Începând cu acest paragraf, până la paragraful II.11, vom urmări îndeaproape evoluţia câtorva dintre cele mai importante cercetări asupra atomului,mergând până la limita la care s-a ajuns în cadrul fizicii cuantice din acea vreme.

Precum se ştie [25], teoria atomistă a substanţei a apărut în primele decenii ale secolului XIX, prin fundamentarea ştiinţifică, în cadrul unor studii şi cercetări minuţioase de chimie, a ceea ce se numea pe atunci ipoteza atomistă. Interesul fizicienilor faţă de teoria atomistă a cunoscut o creştere marcantă începând din anul 1902, când Joseph John Thomson propune primul model compus al atomului. Conform acestui model, atomul era descris ca o sferă microscopică, global electric neutră, alcătuită dintr-o substanţă gelatinoasă, încărcată electric pozitiv, şi având plantaţi, în interiorul ei, electronii. Din punct de vedere electrodinamic (clasic), Thomson consideră că atunci când atomul este excitat, electronii oscilează în jurul poziţiilor de echilibru, emiţând astfel o radiaţie electromagnetică cu un spectru caracteristic respectivului atom. Nu vom insista aici asupra detalierii insuficienţelor modelului lui Thomson, dar menţionăm că s-au efectuat o mulţime de calcule pentru a găsi poziţiile de echilibru ale electronilor şi pentru a corela vibraţiile configuraţiilor electronice cu frecvenţele liniilor spectrale observate, însă totul a fost în zadar, previziunile teoretice fiind infirmate de rezultatele experimentale.

Pornind de la faptul că, insuccesul unui model atât de simplu şi elegant, cum este cel al lui Thomson, nu se poate datora decât cunoaşterii insuficiente a structurii reale a atomului, Ernst Rutherford îşi propune, în anul 1911, să verifice experimental, în mod foarte amănunţit, modelul atomic dat de Thomson, utilizând pentru aceasta o metodă, deosebit de ingenioasă, care stă şi astăzi la baza multor investigaţii ale proprietăţilor materiei la scară nucleară şi subnucleară. Metoda are la bază următoarea idee:

dacă dorim să investigăm "pe viu", aproape direct, proprietăţile sistemelor materiale la scară microscopică atunci nu trebuie să ne mulţumim doar cu informaţiile primite indirect, prin intermediul radiaţiei electromagnetice emise de sistemele materiale când sunt excitate, ci trebuie să acţionăm asupra lor direct, într-o manieră destul de bine controlabilă experimental (dacă se poate şi teoretic), bombardându-le cu fascicule de particule, de asemenea microscopice, care vor ajunge suficient de aproape de aceste sisteme, pentru a cunoaşte adevărata lor natură şi complexitatea forţelor pe care le exercită. Dacă experimentul este bine gândit şi teoria destul de solidă, atunci prin intermediul particulelor incidente pe care le captăm după interacţiune, putem obţine informaţii suplimentare celor obţinute prin analiză spectrală.

Ernst Rutherford, împreună cu elevii săi Hans Geiger şi Ernst Marsden, utilizând o sursă de Po şi un sistem de fante colimatoare, obţin un fascicol quasimonoenergetic de particule α, cu energia 4,7 *MeV/partic.*, care bombardează o foiţă de aur cu grosimea de 0,4 μm şi analizează distribuţia unghiulară a particulelor α împrăştiate, prin numărarea directă a scintilaţiilor produse de acestea într-un scintilator cu sulfură de zinc. In urma prelucrării rezultatelor experimentale ei constată că marea majoritate a particulelor au suferit împrăştieri înainte, sub unghiuri mici (de numai $2-3^o$), dar există "sistematic", cu o frecvenţă medie de apariţie de $1/6 \cdot 10^4$, şi evenimente de împrăştiere sub unghiuri mai mari de 90°. Printr-un raţionament elementar de teoria probabilităţilor, Rutherford demonstrează că apariţia unei deviaţii de unghi mare pe seama suprapunerii unor deviaţii de unghi mic are o frecvenţă mult mai mică decât cea observată. Se ajunge astfel la concluzia că împrăştierea unei particule sub un unghi $\geq 90^o$ se datorează exclusiv unei singure ciocniri suferite de aceasta. Frecvenţa mare a evenimentelor de împrăştiere înainte împreună cu frecvenţa mică a evenimentelor de împrăştiere înapoi reprezintă pentru modelul atomic cu extensie spaţială continuă, pe o rază cam de $10^{-10} m$, o dificultate practic insurmontabilă. Pe de o parte, dacă

presupunem că atomii de Au sunt dispuşi în plane paralele pe care le acoperă în mod compact, atunci foiţa ar fi practic netransparentă pentru fascicolul de particule α din cauza intensităţii foarte mari a forţelor electrostatice repulsive. Deci frecvenţa de apariţie a împrăştierilor înapoi ar trebui să fie de aproximativ 100% . Pe de altă parte, dacă am presupune că "atomii Thomson" sunt cu mult mai transparenţi decât ar rezulta din legile electrodinamicii clasice, atunci, în acord cu raţionamentul probabilistic făcut de Rutherford, frecvenţa împrăştierilor înapoi ar trebui să fie mult mai mică decât cea rezultată experimental.

In consecinţă, Ernst Rutherford presupune că particule α, de sarcină $2e$, interacţionează cu sarcina pozitivă Ze a atomului care este concentrată, împreună cu toată masa lui, într-o sferă de rază mult mai mică decât $10^{-10}m$. Presupunând pentru început că atât particula α cât şi sfera de sarcină Ze sunt sarcini punctuale, ele vor interacţiona cu energia potenţială

$$(5.1) \qquad W(r) = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

unde r este modulul razei vectoare a sarcinii $2e$ faţă de sarcina Ze.

Problema care se pune constă în a calcula dependenţa funcţională de parametrul de ciocnire b, a unghiului de deviaţie Φ a particulei α, în urma interacţiunii (5.1) cu centru împrăştietor (fix) de sarcină Ze şi apoi în estimarea secţiunii diferenţiale microscopice de difuzie (formula lui Rutherford). Având în vedere simetria sferică a potenţialului

$$(5.2) \qquad V(r) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

vom explicita lagrangeianul problemei în sistemul de coordonate sferice $\{r,\theta,\varphi\}$

$$(5.3) \qquad L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2) - \frac{\lambda}{r},$$

unde cu m am notat masa particulei α iar cu λ coeficientul lui $1/r$ din (5.1):

(5.4) $$\lambda = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_o} = \frac{Ze^2}{2\pi\varepsilon_o}.$$

Pentru impulsurile canonic conjugate $\{r,\theta,\varphi\}$ avem expresiile:

(5.5)
$$\text{a)} \quad P_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}$$
$$\text{b)} \quad P_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta}$$
$$\text{c)} \quad P_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}.$$

După cum se observă din expresia lagrangeianului (5.3), acesta este independent de coordonatele $\{\theta,\varphi\}$ şi deci, acestea fiind coordonate ciclice, impulsurile canonic conjugate lor sunt constante, reprezentând două integrale prime ale mişcării:

(5.6)
$$\text{a)} \quad P_\theta = mr^2\dot{\theta} = K$$
$$\text{b)} \quad P_\varphi = mr^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi} = L_z.$$

A treia integrală primă a mişcării este reprezentată chiar de funcţia lui Hamilton, asociată lagrangeianului (5.3), adică

(5.7) $$H = \frac{1}{2m}\left[P_r^2 + \frac{1}{r^2}P_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}P_\varphi^2\right] + \frac{\lambda}{r},$$

ceea ce înseamnă, luând în considerare relaţiile (5.5),

(5.8) $$\frac{m}{2}\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \frac{K^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2} + \frac{L_z^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2\sin^2\theta} + \frac{\lambda}{r} = E,$$

unde $E=const.>0$ reprezintă energia totală a particulei α.

Este momentul să "clarificăm" configuraţia iniţială a problemei, determinând astfel valorile constantelor introduse (K,L_z,E). Vom considera că particula incidentă are viteza iniţială

BCU "CAROL I" UNIVERSITY LIBRARY

(5.9) $[\vec{v}]_{t=0} = -v_o \vec{u}_z$

şi se îndreaptă spre planul (xOy) pe o traiectorie conţinută în planul $\varphi = \frac{\pi}{2}$, adică $(yOz: y>0)$, venind din punctul foarte îndepărtat (teoretic de la infinit), de coordonate carteziene $(0,b,\infty)$, unde b reprezintă aşa numitul parametru de ciocnire (Fig. 5.1).

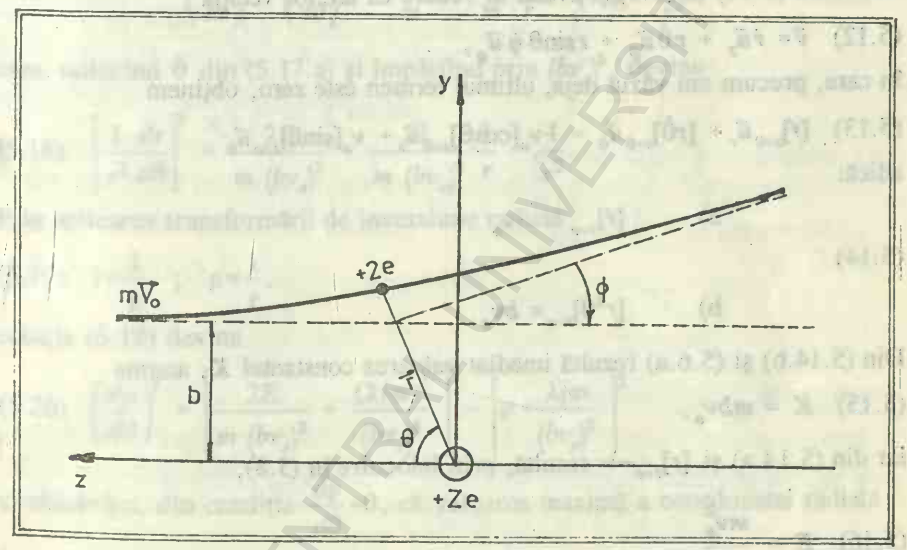


Fig. 5.1

Din faptul că viteza iniţială (5.9) nu are nici o componentă după versorul azimutal $\vec{u}_\varphi$ rezultă

$$[\dot{\varphi}]_{t=0} \equiv 0$$

şi cum la momentul iniţial avem de asemenea

$$[r \sin\theta]_{t=0} = b,$$

BCU ASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem pentru constanta L_z a mişcării, utilizând relaţia (5.6.b), valoarea

(5.10) $L_z=0$.

Pentru determinarea constantelor K şi E ne folosim de descompunerea versorului $\vec{u}_z$ în raport cu versorii radial şi de declinaţie $(\vec{u}_r, \vec{u}_\theta)$

(5.11) $\vec{u}_z = \vec{u}_r\cos\theta - \vec{u}_\theta\sin\theta$.

Inlocuind (5.11) în (5.9) şi având în vedere că are loc relaţia

(5.12) $\vec{v} = \dot{r}\vec{u}_r + r\dot{\theta}\vec{u}_\theta + r\sin\theta\,\dot{\varphi}\,\vec{u}_\varphi$,

în care, precum am văzut deja, ultimul termen este zero, obţinem

(5.13) $[\dot{r}]_{t=0}\vec{u}_r + [r\dot{\theta}]_{t=0}\vec{u}_\theta = -v_o[\cos\theta]_{t=0}\vec{u}_r + v_o[\sin\theta]_{t=o}\vec{u}_\theta$

adică:

(5.14)

a) $[\dot{r}]_{t=o} = -v_o$

b) $[r^2\dot{\theta}]_{t=o} = bv_o$.

Din (5.14.b) şi (5.6.a) rezultă imediat valoarea constantei K, anume

(5.15) $K = mbv_o$,

iar din (5.14.a) şi $[r]_{t=o}\to\infty$ rezultă, prin înlocuire în (5.8),

(5.16) $E = \dfrac{mv_o^2}{2}$.

Aşa cum ne aşteptam, E reprezintă energia cinetică a particulei α din fasciculul incident, atunci când se află în punctul iniţial infinit îndepărtat de centrul împrăştietor O, de sarcină electrică pozitivă Ze. Revenim acum la relaţiile (5.6.a) şi (5.8), în care utilizăm (5.15) şi (5.16) şi obţinem ecuaţiile:

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.17) a) $r^2\dot{\theta} = bv_o$

b) $$\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 = \frac{2E}{m} - \frac{2\lambda}{m}\cdot\frac{1}{r} - (bv_o)^2\cdot\frac{1}{r^2}.$$

Relaţia (5.17.b) se mai poate scrie

$$\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 \cdot \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2 = \frac{2E}{m} - \frac{2\lambda}{m}\cdot\frac{1}{r} - (bv_o)^2\cdot\frac{1}{r^2},$$

care, utilizând $\dot{\theta}$ din (5.17.a) şi împărţind prin $(bv_o)^2$, devine

(5.18) $$\left[\frac{1}{r^2}\frac{dr}{d\theta}\right]^2 = \frac{2E}{m(bv_o)^2} - \frac{2\lambda}{m(bv_o)^2}\cdot\frac{1}{r} - \frac{1}{r^2}.$$

Prin aplicarea transformării de inversiune radială

(5.19) $$r=\frac{1}{\rho} \quad ; \quad \rho=\frac{1}{r},$$

ecuaţia (5.18) devine

(5.20) $$\left(\frac{d\rho}{d\theta}\right)^2 = \left[\frac{2E}{m(bv_o)^2} + \frac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^4}\right] - \left[\rho + \frac{\lambda/m}{(bv_o)^2}\right]^2$$

şi observăm, din condiţia $\frac{d\rho}{d\theta}=0$, că valoarea maximă a coordonatei radiale inversate este

(5.21) $$\rho_M = \left[\frac{2E}{m(bv_o)^2} + \frac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^4}\right]^{1/2} - \frac{\lambda/m}{(bv_o)^2}.$$

In termenii coordonatelor sferice modificate $\{\rho,\theta,\varphi\}$ rezultă că particula vine din punctul $\left(0,0,\frac{\pi}{2}\right)$ şi este împrăştiată spre punctul $\left(0,\theta_M,\frac{\pi}{2}\right)$ după ce a trecut prin punctul în care $\rho=\rho_M$. Pe baza acestei observaţii, putem fixa uşor semnele din faţa radicalului obţinut prin extragerea rădăcinii pătrate în ambii

BCU "ASTRA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

membri din (5.20), adică:

$$\text{a)} \qquad \frac{d\rho}{d\theta} = \left[\frac{2E}{m\,(bv_o)^2} + \frac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^4} - \left(\rho + \frac{\lambda/m}{(bv_o)^2}\right)^2\right]^{1/2},$$

pentru ρ de la 0 la ρ_M

(5.22)

$$\text{b)} \qquad \frac{d\rho}{d\theta} = -\left[\frac{2E}{m\,(bv_o)^2} + \frac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^2} - \left(\rho + \frac{\lambda/m}{(bv_o)^2}\right)^2\right]^{1/2},$$

pentru ρ de la ρ_M la 0.

Definind o nouă variabilă prin

$$(5.23) \quad \psi = \frac{\rho + \dfrac{\lambda/m}{(bv_o)^2}}{\left[\dfrac{2E}{m\,(bv_o)^2} + \dfrac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^4}\right]^{1/2}},$$

care are în $\rho=0$ valoarea

$$(5.24) \quad \psi_o = \frac{\lambda/m}{(bv_o)^2}\left[\frac{2E}{m\,(bv_o)^2} + \frac{(\lambda/m)^2}{(bv_o)^4}\right]^{-1/2} = \left[1+2m\left(\frac{bv_o}{\lambda}\right)^2 \cdot E\right]^{-1/2}$$

şi în $\rho=\rho_M$ are valoarea $\psi_M=1$, ecuaţiile (5.22) se pot scrie:

$$\text{a)} \qquad d\theta = \frac{d\psi}{\sqrt{1-\psi^2}} = d[\arcsin\,\psi]$$

(5.25)

$$\text{b)} \qquad d\theta = -\frac{d\psi}{\sqrt{1-\psi^2}} = -d[\arcsin\,\psi].$$

De aici rezultă pentru coordonata sferică unghiulară θ_M, corespunzătoare punctului spre care se îndreaptă particula după interacţiune, expresia

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\theta_M = \int_{\psi_o}^{1} d(\text{arc sin } \psi) - \int_{1}^{\psi_o} d(\text{arc sin } \psi) = 2\int_{\psi_o}^{1} d(\text{arc sin } \psi)$$

adică

$$(5.26)\quad \theta_M = \pi - 2 \text{ arc sin}\left[\left(1+2m\left(\frac{bv_o}{\lambda}\right)^2 \cdot E\right)^{-1/2}\right].$$

Notând unghiul de deviaţie cu

$$(5.27)\quad \Phi = \pi - \theta_M$$

şi folosind identitatea trigonometrică

$$\text{arc sin}\left[(1+x^2)^{-1/2}\right] = \text{arc } tg(x)$$

rezultă din (5.26) expresia căutată a dependenţei funcţionale dintre unghiul de deviaţie ϕ, parametrul de ciocnire b şi restul mărimilor caracteristice m, E, λ (dat de (5.4)), adică

$$(5.28)\quad ctg\left(\frac{\phi}{2}\right) = \frac{4\pi\varepsilon_o E}{Ze^2}\cdot b.$$

Deoarece parametrul de ciocnire nu se poate determina experimental, se impune utilizarea lui, şi deci a relaţiei (5.28), în definirea şi estimarea unei mărimi accesibile determinărilor experimentale directe. După cum este bine cunoscut din teoria generală a ciocnirilor unui fascicul de particule cu un centru difuzant, această mărime este secţiunea diferenţială eficace de împrăştiere, reprezentând aria suprafeţei din jurul nucleului pe care trebuie să cadă particula α pentru a fi difuzată în unghiul solid $d\Omega$. Pentru acest caz, ea are expresia simplă

$$(5.29)\quad d\sigma = 2\pi b db = b\left|\frac{db}{d\phi}\right|\frac{d\Omega}{\sin\phi}, \quad d\Omega = 2\pi \sin\phi \, d\phi.$$

Derivând după ϕ în ecuaţia (5.28) şi înlocuind pe $\frac{db}{d\phi}$ în relaţia (5.29), se obţine formula lui Rutherford

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(5.30)\quad \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mu} = \left[\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_o E}\right]^2 \cdot \frac{1}{\sin^4(\phi/2)}.$$

Din ipotezele care au stat la baza metodei de calcul utilizate, rezultă clar că formula lui Rutherford este valabilă pentru sarcini punctuale aflate într-un proces de împrăştiere coulombiană, de potenţial (5.2). Deoarece în cadrul primelor experienţe efectuate, Rutherford nu a observat abateri de la formula (5.30), el trage concluzia, care într-o foarte mare măsură este adevărată, că legea lui Coulomb este valabilă şi în microcosmos, la nivelul atomului. Mai mult, fiind atât un experimentator cât şi un teoretician de excepţie, el ia în considerare precizia propriilor rezultate experimentale şi calculează că raza sferei în care este concentrată sarcina pozitivă a atomului de Au, nu poate fi mai mare decât $3\cdot10^{-14}m$. Observând că rezultatele generale nu se modifică simţitor dacă se utilizează ca ţinte şi foiţe de Cu, Ag, sau Pt, Ernst Rutherford introduce în fizică **MODELUL PLANETAR AL ATOMULUI** (1911):

> Sarcina pozitivă Ze şi o parte din masa atomului sunt concentrate într-o sferă de rază R, de aproximativ $10^{-15} - 10^{-14}m.$, care formează nucleul atomului. Cei Z electroni se rotesc în jurul acestuia, la distanţe de ordinul a $10^{-10}m.$, fiind supuşi predominant potenţialului coulombian al sarcinii centrale şi mişcându-se în acord cu legile mecanicii şi electrodinamicii clasice.

Deşi, la scurt timp după apariţia sa, a devenit limpede că nici acest model nu explică structura spectrelor atomice, totuşi el s-a impus în fizica acelei perioade. Acesta este motivul pentru care Niels Bohr alege fără nici o ezitare, dintre toate modelele atomice clasice, tocmai modelul lui Rutherford şi elaborează vestitele postulate şi nu mai puţin vestita relaţie de cuantificare, într-o manieră adaptată special configuraţiei planetare.

BCU IAŞI

II.6. Formula lui Balmer. Principiul de combinare Rydberg-Ritz

De la data de 6 Februarie 1672, când a fost prezentată lucrarea "Noua teorie a luminii şi a culorilor" de către Newton în cadrul Societăţii Regale (Royal Society) şi până la mijlocul secolului trecut, s-a strâns un imens material de date experimentale spectroscopice, în care, aparent, guverna haosul.

Cercetările întreprinse de Gustav Kirchoff şi Robert Wilhelm Bunsen, în 1859, au arătat că fiecare linie a spectrului se datoreşte prezenţei unui element dat şi invers, ceea ce a însemnat începutul analizei spectrale. Studiul precis al spectrului atomului de hidrogen, observat deja de Anders Jones Ångström, i-a permis lui Johann Jacob Balmer să dea, în anul 1885, pentru lungimea de undă a celor 9 linii cunoscute atunci, relaţia

$$(6.1) \qquad \lambda = B\,\frac{m^2}{m^2-4}\;;\quad B=3645{,}6\ \text{Å}\;;\quad m=3,4,5....$$

Transcriind formula lui Balmer în raport cu numărul de undă $\tilde{\nu}=1/\lambda$, adică

$$(6.2) \qquad \tilde{\nu} = R\left[\frac{1}{2^2}-\frac{1}{m^2}\right]\;;\quad R=1{,}0967\cdot 10^5\ cm^{-1}\;;\quad m=3,4,5,...,$$

Janne Rydberg arată, în 1890, că şi liniile spectrale ale atomilor unor alte elemente au numărul de undă dat de o relaţie foarte asemănătoare relaţiei (6.2), obţinută prin generalizarea acesteia, adică

$$(6.3) \qquad \tilde{\nu} = R\left[\frac{1}{(n+\alpha)^2}-\frac{1}{(m+\beta)^2}\right]\;;\quad m=n+1,n+2,....$$

In această relaţie, numită formula lui Rydberg, n este un număr natural care are aceeaşi valoare pentru o serie spectrală, iar α şi β sunt constante empirice caracteristice elementului în cauză. Chiar de la apariţie, formula lui Rydberg cunoaşte un succes deosebit. Exista în sfârşit o posibilitate destul de concretă de a se pune ordine în noianul de date experimentale referitoare la

spectrele de emisie ale atomilor. Bineînţeles, fiind de natură preponderent empirică, formula lui Rydberg nu avea o valabilitate generală garantată, dar, de exemplu în cazul aplicării ei la spectrele de emisie ale metalelor alcaline, concordanţa era mai mult decât satisfăcătoare, ceea ce îi permite lui Rydberg să efectueze următoarea sistematizare a seriilor spectrale ale acestor elemente:

a) SERIA PRINCIPALA : $n=1$; $m=2,3,4,...$

$$\tilde{\nu}_{(p)} = R\left[\frac{1}{(1+s)^2} - \frac{1}{(m+p)^2}\right], \tag{6.4}$$

b) SERIA FINA : $n=2$; $m=2,3,4,...$

$$\tilde{\nu}_{(f)} = R\left[\frac{1}{(2+p)^2} - \frac{1}{(m+s)^2}\right], \tag{6.5}$$

c) SERIA DIFUZA : $n=2$; $m=3,4,5,...$

$$\tilde{\nu}_{(d)} = R\left[\frac{1}{(2+p)^2} - \frac{1}{(m+d)^2}\right], \tag{6.6}$$

d) SERIA BERGMANN : $n=3$; $m=4,5,6,...$

$$\tilde{\nu}_{(B)} = R\left[\frac{1}{(3+d)^2} - \frac{1}{(m+f)^2}\right], \tag{6.7}$$

unde s,p,d,f sunt constante pentru elementul considerat.

Ulterior, prin efectuarea unor măsurători îngrijite de identificare a cât mai multora dintre liniile spectrale prezise de formulele (6.4-6.7) în cadrul seriilor spectrale (a-d), s-a constatat că există şi linii spectrale, ale aceluiaşi element chimic studiat, necuprinse în seriile indicate. Soluţia acestei probleme a fost dată, de asemenea pe cale semiempirică, de către Walter Ritz în anul 1908. Pornind de la constatarea lui Rydberg, că numerele de undă pentru liniile unui spectru se pot obţine prin intermediul relaţiei

(6.8) $\tilde{\nu} = T_k(n_2) - T_j(n_1)$

din funcţiile întregi $\{T_k(n)\}$ denumite termeni spectrali, Ritz formulează vestitul principiu de combinare în acord cu care

prin adunarea sau scăderea numerelor de undă a două linii spectrale, care au un termen spectral comun, se obţine un număr de undă al unei alte linii spectrale.

De exemplu, din numerele de undă (6.8) şi

(6.9) $\tilde{\nu}' = T_m(n_3) - T_k(n_2)$,

obţinem prin adunarea numerelor de undă:

(6.10) $\nu_{(1)} = [T_m(n_3) - T_k(n_2)] + [T_k(n_2) - T_j(n_1)] = T_m(n_3) - T_j(n_1)$,

iar din (6.11) şi (6.8) obţinem prin scădere, numărul de undă

(6.11) $\nu_{(2)} = [T_m(n_3) - T_j(n_1)] - [T_k(n_2) - T_j(n_1)] = T_m(n_3) - T_k(n_2)$.

Referitor la "eficienţa" acestui principiu, trebuie să menţionăm că prin aplicarea lui se obţin într-adevăr linii spectrale "noi", faţă de cele prezise de formula lui Rydberg, dar multe dintre aceste linii noi nu sunt observate experimental. Pe scurt, principiul de combinare Rydberg-Ritz prevede prea multe linii spectrale. Această nouă problemă îşi va găsi rezolvarea în cadrul Mecanicii Cuantice, prin elaborarea unei teorii consecvente pentru aşa numitele reguli de selecţie.

Revenind la cazul atomului de hidrogen, termenul spectral este de forma $T(n) = R/n^2$ şi deci, conform principiului de combinare, numerele de undă ale liniilor spectrale observate se vor găsi printre cele date de formula

(6.12) $\tilde{\nu} = T(n) - T(m)$; $m = n+1, n+2, \ldots$

Intr-adevăr, după ce în 1885 este observată, în domeniul vizibil, seria Balmer (n=2), în anul 1901 este evidenţiată în domeniul infraroşu seria Paschen (n=3) iar în 1914, în ultraviolet, seria Lyman (n=1). Seriile spectrale n=4, n=5 au fost observate în infraroşu îndepărtat abia după 10 ani de către Brackett (n=4) în 1922 şi Pfund (n=5) în 1924.

II.7. Teoria lui Bohr asupra atomului de hidrogen şi a ionilor hidrogenoizi

"Teoria lui Bohr a marcat o etapă capitală în istoria fizicii contemporane : încă de la apariţie a permis unificarea domeniului imens al spectroscopiei şi a făcut să se înţeleagă caracterul legilor care o guvernează, apoi generalizată sub forma unei teorii coerente a cuantificării, ea a repurtat nenumărate victorii în explicarea şi previziunea fenomenelor atomice"

Louis-Victor de Broglie[3]

Intre 1911 şi 1913, situaţia în acele domenii ale fizicii care se ocupau cu studiul proprietăţilor atomului, devenise aproape tragi-comică. Spectroscopiştii, înarmaţi cu formula lui Rydberg, principiul de combinare al lui Ritz şi tot felul de reguli speciale, una "mai empirică decât alta" (dar care funcţionau "de minune") se descurcau , parcă mai în voie ca oricând, prin hăţişul de serii şi linii spectrale, în timp ce teoreticienii, privind la aceştia şi parcă spunând "iartă-i Doamne că nu ştiu ce fac", nu mai ştiau ce să facă. Aspectul cel mai de neînţeles era reprezentat de însuşi modelul planetar al atomului care, în cadrul electrodinamicii clasice, era în acelaşi timp şi adevărat şi fals. De ce era, sau cel puţin părea a fi, adevărat?, deoarece explica simplu şi direct rezultatele experimentelor Rutherford-Geiger-Marsden, iar acestea, la rândul lor, confirmând formula lui Rutherford, confirmau valabilitatea în microcosmos a legii lui Coulomb, din care rezulta forţa ce menţinea în jurul nucleului învelişul electronic. De ce era fals?, deoarece clasic, în mod paradoxal, exact această forţă îl împiedica să "trăiască". Să analizăm mai în detaliu sensul acestei afirmaţii, luând ca exemplu concret cazul atomului de hidrogen. Presupunând, pentru început, că

[3] *La physique nouvelle et les quanta*, Ed. *Ernest Flammarion*, 1937, p. 152.

electronul descrie o traiectorie circulară, de rază r, în jurul nucleului cu sarcina $+e$, atunci, din ecuaţia de mişcare

$$(7.1) \qquad m_o\vec{a} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o}\cdot\frac{\vec{r}}{r^3},$$

rezultă

$$(7.2) \qquad \frac{m_o v^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_o r},$$

de unde obţinem pentru energia totală $E = E_{cin} + E_{pot}$, $cu\ E_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}$ expresia

$$(7.3) \qquad E = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_o r}.$$

In conformitate însă cu electrodinamica clasică, orice particulă încărcată electric şi aflată în mişcare accelerată, emite în spaţiu o radiaţie electromagnetică a cărei putere, în cazul nerelativist, este dată de expresia

$$(7.4) \qquad \wp = \frac{\mu_o e^2}{6\pi c}a^2$$

unde a, e, μ_o şi c sunt respectiv acceleraţia particulei, sarcina acesteia, permeabilitatea magnetică a vidului şi viteza luminii. Din (7.3) şi (7.1) obţinem relaţia

$$(7.5) \qquad a = \frac{16\pi\varepsilon_o}{m_o e^2}E^2$$

care, înlocuită în (7.4), ne conduce, pentru energia totală, la următoarea ecuaţie de bilanţ radiativ $\left(\wp = -\frac{dE}{dt}\right)$:

$$(7.6) \qquad \frac{dE}{dt} = -\frac{128\pi\varepsilon_o}{3(m_o e)^2 c^3}\cdot E^4.$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Soluţia generală a ecuaţiei (7.6) este de forma

$$(7.7) \qquad E = E_o \left[1 + \frac{128\pi\varepsilon_o}{(m_o e)^2} \left(\frac{E_o}{c} \right)^3 \cdot t \right]^{-1/3},$$

unde E_o este energia totală la momentul iniţial $t=0$. Cum energia totală iniţială trebuie să fie negativă, electronul aflându-se într-o stare legată, rezultă că la momentul

$$(7.8) \qquad \tau = \frac{(m_o e)^2}{128\pi\varepsilon_o} \left(\frac{c}{|E_o|} \right)^3$$

energia $E(\tau)$ devine negativ infinită, adică, după ce a pierdut continuu energie, prin radiaţie de unde electromagnetice, electronul a căzut în nucleu. Considerând pentru $r_o=r(t=0)$ valoarea caracteristică de $10^{-10}m$, rezultă din (7.3) o energie iniţială de $-11{,}7\cdot 10^{-19}\ J$, adică $|E_o|=11{,}7\cdot 10^{-19}\ J$, pe care înlocuind-o în (7.8), obţinem pentru durata clasică de viaţă a atomului de hidrogen

$$(7.9) \qquad \tau \approx 10^{-10} \text{ sec.}$$

Dacă printr-o nefericită întâmplare, Natura "şi-ar pune mintea" cu acest rezultat, Universul ar deveni, într-o fracţiune de secundă, un glob de radiaţie electromagnetică ciuruit ca un burete de o mulţime de găuri negre microscopice. Deci, insuficienţa clasic-fundamentală a modelului Rutherford este însăşi instabilitatea sa electrodinamică. Si chiar dacă, printr-un "teribil act de renunţare", s-ar presupune că electronul îşi compensează periodic energia pierdută prin radiaţie, modelul planetar al atomului tot nu ar putea să explice structura spectrelor observate şi asta din următoarele motive:

- pe de o parte, raza orbitei fiind oarecare, rezultă că viteza unghiulară a electronului

$$(7.10) \qquad \omega = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o m_o}} \cdot \frac{1}{r^{3/2}}$$

este de asemenea oarecare şi deci, radiaţia electromagnetică emisă,

având pulsaţia (7.10), ar trebui să posede un spectru continuu, pe de altă parte, dacă raza orbitei electronului are, dintr-un motiv oarecare, o valoare fixată r_o, astfel încât, viteza unghiulară a electronului

(7.11) $$\omega_o = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_o m_o}} \cdot \frac{1}{r_o^{3/2}}$$

este şi ea fixată, atunci spectrul radiaţiei emise ar trebui să conţină fundamentala (7.11) împreună cu toate armonicele sale, adică $\{n\omega_o\}_{n\in N^*}$ ceea ce din nou nu se confirmă experimental.

Atât problema stabilităţii modelului Rutherford, cât şi problema explicării teoretice a structurii spectrelor atomice, sunt rezolvate pentru prima oară, într-o formă teoretică satisfăcătoare, de către fizicianul danez Niels Henrik David Bohr în anul 1913, la vârsta de numai 28 de ani.

Revenind la Copenhaga, după ce efectuase la Cambridge un stagiu de perfecţionare sub conducerea lui Ernst Rutherford şi luase cunoştinţă cu modelul planetar al atomului, Bohr îşi concentrează toate eforturile asupra atomului de hidrogen, analizându-l în cazul cel mai simplu al orbitelor electronice circulare. Ideile călăuzitoare sunt în număr de trei:

1) Ipoteza lui Planck este perfect valabilă la nivelul sistemului atomic, adică energia atomului este cuantificată;
2) Determinarea spectrului energetic discret s-ar putea face dacă la nivel atomic ar funcţiona o lege de selecţie radială, de tip Titius-Bode, de natură eminamente cuantică, din care s-ar putea determina mulţimea numărabilă de valori permise pentru razele orbitelor staţionare ale electronului;
3) Ipoteza lui Einstein este de asemenea valabilă la nivelul atomic, adică atomul emite şi absoarbe cuante de radiaţie electromagnetică.

Să urmărim, prin intermediul mecanicii analitice, această parte de început a raţionamentului lui Bohr în cazul atomului de hidrogen. Plasând originea referenţialului cartezian în centrul nucleului, pe care îl considerăm

suficient de masiv pentru a nu fi antrenat sensibil de mişcarea electronului, vom orienta axele referenţialului astfel încât orbita electronică circulară, de rază r, să fie conţinută în planul (xOy). In acest caz, lucrând în coordonate polare $\{r,\varphi\}$, lagrangeianul sistemului va avea forma

$$(7.12)\quad L = \frac{1}{2}m_o r^2\dot{\varphi}^2 + \frac{\lambda}{r}\quad,\quad \lambda = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o}.$$

Deoarece coordonata φ este ciclică, rezultă că impulsul canonic conjugat

$$(7.13)\quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}} = m_o r^2\dot{\varphi},$$

având semnificaţia de moment cinetic orbital, este constant, deci

$$(7.14)\quad m_o r^2\dot{\varphi} = K.$$

Hamiltonianul asociat funcţiei Lagrange (7.12) are expresia

$$(7.15)\quad H = \frac{p_\varphi^2}{2m_o r^2} - \frac{\lambda}{r}$$

şi reprezintă, datorită caracterului conservativ al potenţialului coulombian, energia totală a electronului pe orbita circulară de rază r, adică, folosind (7.13) şi (7.14)

$$(7.16)\quad E = \frac{K^2}{2m_o r^2} - \frac{\lambda}{r}.$$

Din punct de vedere clasic, restrângând sensul noţiunii de staţionaritate la cel de echilibru dinamic, electronul se va plasa pe acea orbită circulară, a cărei rază $r(K)$ realizează un minim al energiei totale, adică

$$(7.17)\quad \frac{\partial E}{\partial r} = \frac{\lambda}{r^2(K)}\left[1 - \frac{K^2}{m_o\lambda}\cdot\frac{1}{r(K)}\right] = 0,$$

de unde rezultă, pentru coordonata radială de echilibru, expresia

$$(7.18)\quad r(K) = \frac{K^2}{m_o\lambda}.$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Se poate verifica imediat că pentru valoarea (7.18) este valabilă inegalitatea

$$(7.19)\quad \frac{\partial^2 E}{\partial r^2} > 0,$$

care certifică natura de minim a extremului energiei (7.16) în "punctul" (7.18). Inlocuind expresia (7.18) în expresia (7.16), obţinem pentru valoarea energiei minime următorul rezultat

$$(7.20)\quad E(K) = -\frac{m_o \lambda^2}{2K^2}.$$

Privind relaţiile (7.18) şi (7.20), observăm că dacă s-ar putea justifica prezenţa unui spectru discret $\{K_n\}_{n\in N^*}$ de valori ale momentului cinetic orbital, în care să intervină cuanta h a lui Planck, atunci ideile ghid 2) şi 1) ar prinde un contur precis. Astfel, deoarece ecuaţia (7.18) scrisă sub forma

$$(7.21)\quad r_n = \frac{K_n^2}{m_o \lambda},$$

ar selecţiona mulţimea numărabilă a orbitelor staţionare ale electronului, iar ecuaţia (7.20) scrisă sub forma

$$(7.22)\quad E_n = -\frac{m_o \lambda^2}{2K_n^2},$$

ar determina spectrul energetic discret asociat mulţimii numărabile a orbitelor electronice permise. In ce priveşte "punerea în ecuaţie" a celei de a treia idei călăuzitoare, problema este destul de simplă dacă se face apel la legea conservării energiei în sistemul atom+cuantă de radiaţie:

- dacă iniţial electronul se găseşte pe orbita staţionară exterioară, r_e şi energie E_e, atunci el "poate sări" pe o orbită interioară, de rază r_i şi energie E_i, emiţând o cuantă de radiaţie electromagnetică de energie

$$(7.23)\quad h\nu_{ie} = E_e - E_i$$

- dacă inițial electronul este pe orbita interioară (r_i, E_i), atunci el poate absorbi o cuantă de radiație de energie (7.23) pentru a ajunge pe orbita staționară exterioară (r_e, E_e).

In noianul de povestiri, anecdote și chiar legende, ce alcătuiesc partea folclorică a istoriei fizicii, se spune că forma concretă a relației de cuantificare a momentului cinetic orbital K, i-a venit în minte lui Bohr, în timpul unui joc de "pilotă" când, realizează că dacă distanța l dintre jucător și perete ar fi fixă și mingea ar avea permanent viteza v_o, atunci aceasta ar executa o mișcare periodică de frecvență $\nu = v_o/2l$. Dacă mingea ar fi un obiect cuantic (microscopic), atunci probabil că i s-ar putea impune relația lui Planck

$$\frac{m_o v_o^2}{2} = nh\nu = \frac{nhv_o}{2l} \quad , n \in N^*$$

care conduce imediat la relația "mult mai interesantă"

$$m_o v_o l = hn .$$

Aici intervine remarcabilul simț analogic cu care era dotat Niels Bohr; considerând $l=2\pi r$, adică lungimea orbitei electronului și $v_o = r\dot{\varphi}$, adică viteza periferică a acestuia, Bohr obține vestita relație de cuantificare ce îi poartă numele:

(7.24) $$K_n = \frac{h}{2\pi} \cdot n, \quad \text{cu} \quad n \in N$$

și care afirmă că

pot exista numai acele orbite electronice pentru care momentul cinetic orbital al electronului, în mișcarea sa în jurul nucleului, este un multiplu întreg de cuante $h/2\pi$ (aceste orbite se numesc staționare).

Pentru a da o formă definitivă celor trei idei călăuzitoare, Bohr formulează pe lângă relația de cuantificare (7.24), și următoarele două postulate inseparabil legate de aceasta:

Postulatul Mecanic

In atom, stările permise ale electronului sunt toate staţionare, fiind caracterizate de un spectru energetic discret $\{E_n\}_{n\in N^*}$. Intr-o astfel de stare, deci în mişcare pe o orbită staţionară, electronul nu emite şi nici nu absoarbe energie radiantă electromagnetică.

Postulatul Optic

Atomul emite (absoarbe) cuante de radiaţie electromagnetică la trecerea dintr-o stare staţionară E_e (E_i) într-o stare staţionară E_i (E_e) iar frecvenţa cuantei emise (absorbite) este dată de relaţia

(7.25) $$\nu = \frac{E_e - E_i}{h}.$$

Prin utilizarea relaţiei de cuantificare (7.24) în expresiile (7.21), (7.22) ale razei orbitei staţionare a electronului şi a energiei acestuia în starea staţionară caracterizată de numărul cuantic principal $n\in N^*$, se obţin expresiile "definitive" ale acestor mărimi:

(7.26)

a) $$r_n = \frac{\varepsilon_o h^2}{\pi m_o e^2} \cdot n^2$$

b) $$E_n = -\frac{m_o e^4}{8\varepsilon_o^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

în cadrul teoriei lui Bohr asupra atomului de hidrogen.

Pe baza expresiilor (7.26) să prezentăm cele mai importante succese ale modelului atomic formulat de Bohr. In primul rând, pentru $n=1$ în (7.26.a), se obţine aşa numita "rază Bohr" corespunzătoare celei mai interioare orbite staţionare denumită şi pătura K sau orbita fundamentală

(7.27) $r_1 = a = \dfrac{\varepsilon_o h^2}{\pi m_o e^2} = 0{,}53\ \text{Å}.$

Rezultă din (7.27) că un atom de hidrogen aflat în starea fundamentală (n=1) are un diametru de 1,06 Å ceea ce era în deplină concordanţă cu tot ce se ştia până atunci (1913) despre dimensiunile atomului de H.

In al doilea rând, tot pentru starea fundamentală (n=1), care este o stare perfect stabilă, rezultă din (7.26.b) energia

(7.28) $E_1 = -\dfrac{m_o}{8}\left(\dfrac{e^2}{\varepsilon_o h}\right)^2 = -13{,}56\ eV,$

care, luată cu semn schimbat, reprezintă energia ce trebuie comunicată electronului atomului de hidrogen, aflat în stare fundamentală, pentru a-l scoate "definitiv" din câmpul coulombian al nucleului, adică reprezintă energia de ionizare a atomului de hidrogen

(7.29) $E_H = -E_1 = 13{,}56\ eV.$

Această valoare este în foarte bună concordanţă cu valoarea potenţialului de ionizare a hidrogenului determinat printr-o gamă foarte largă de metode experimentale.

Dar, cele mai solide confirmări ale modelului Bohr vin tocmai din domeniul care crease cele mai mari necazuri modelului Rutherford, adică din studiul spectrului de radiaţie al hidrogenului. Astfel, utilizând relaţia (7.26.b) pentru energiile celor două stări staţionare n, m cu $n<m$, rezultă din (7.25) pentru frecvenţa liniei spectrale corespunzătoare tranziţiei $m \leftrightarrows n$ (emisie, respectiv absorbţie) expresia

(7.30) $\nu_{nm} = \dfrac{m_o e^4}{8\varepsilon_o^2 h^3}\left[\dfrac{1}{n^2} - \dfrac{1}{m^2}\right],$

care revine, prin împărţire în ambii membri cu viteza luminii, la expresia numărului de undă

(7.31) $\tilde{\nu}_{nm} = R_o \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right]$, $R_o = \frac{m_o e^4}{8c\varepsilon_o^2 h^3}$,

care este într-o excelentă concordanţă funcţională cu formula lui Rydberg (6.3), care pentru $\alpha = \beta = 0$ descrie semiempiric întregul ansamblu al seriilor spectrale ale hidrogenului. Calculul constantei Rydberg-Bohr R_o dă pentru aceasta valoarea

(7.32) $R_o = 109737{,}3\ cm^{-1}$

care, după cum se observă prin comparare directă cu valoarea constantei Rydberg din expresia (6.2), este puţin mai mare decât aceasta. Uşoara discrepanţă semnalată a fost corectată imediat, tot de către Niels Bohr, prin înlocuirea masei m a electronului, ce intervine în expresia lui R_o, cu masa redusă

(7.33) $\mu = \frac{m_o M_o}{m_o + M_o} \cong m_o\left(1 - \frac{m_o}{M_o}\right)$; $\frac{m_o}{M_o} = \frac{1}{1840} < 1$

a sistemului electron-necleu (proton), adică prin luarea în considerare a antrenării nucleului. In urma acestei corecţii teoretice concordanţa

(7.34) $R = R_o \left[1 - \frac{m_o}{M_o}\right]$

este cu totul remarcabilă şi a reprezentat unul din motivele "cantitative" cele mai serioase pentru care Niels Henrik David Bohr primeşte, în anul 1922, Premiul Nobel pentru *cercetări asupra structurii atomului şi a liniilor spectrale ale radiaţiilor acestora.*

Inlocuind în expresia (7.31) pentru $\tilde{\nu}_{nm}$, pe R_o cu valoarea corectă (7.34), se obţine exprimarea teoretică exactă (cel puţin la nivelul anilor 1913) a formulei lui Rydberg pentru numerele de undă ale liniilor spectrale ale atomului de hidrogen

(7.35) $\tilde{\nu}_{nm} = R_o \left[1 - \frac{m_o}{M_o}\right] \cdot \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right]$.

Această formulă avea să fie utilizată în mod strălucit, după 19 ani de la apariţia modelului Bohr, de către David Urey în calcularea masei primului izotop al hidrogenului, deuteriul, pe care Urey tocmai "îl descoperise în spectrul de radiaţie al hidrogenului lichid". Astfel, în anul 1932, examinând cu un spectroscop de înaltă rezoluţie "partea roşie" a seriei Balmer, Urey observă un "companion violet" al liniei H_α(λ=6563Å) a hidrogenului, situat la numai 1,78 Å de acesta. Cum puritatea probei de hidrogen lichid era suficient de înaltă, Urey deduce, în baza formulei (7.35), cu n=2 şi m=3, că "satelitul" observat provine de la atomi de hidrogen cu masa nucleului mult mai mare decât masa nucleului hidrogenoid uşor, adică a protonului. Notând cu λ_α lungimea de undă a liniei H_α şi cu λ_c lungimea de undă a companionului, se poate scrie (utilizând (7.35))

$$(7.36)\quad \frac{\lambda_\alpha-\lambda_c}{\lambda_\alpha}=\frac{\Delta\lambda}{\lambda_\alpha}=1-\frac{1-\frac{m_o}{M_o}}{1-\frac{m_o}{M}}\cong\frac{m_o}{M_o}\left(1-\frac{M_o}{M}\right)$$

unde M este masa nucleului de hidrogen greu. Din (7.36) rezultă imediat

$$(7.37)\quad 1-\frac{M_o}{M}=\frac{M_o\Delta\lambda}{m_o\lambda_\alpha},$$

de unde se obţine pentru masa M a izotopului greu, valoarea

$$(7.38)\quad M=\frac{M_o}{1-\frac{M_o\Delta\lambda}{m_o\lambda_\alpha}}=\frac{M_o}{1-1840\cdot\frac{1,78}{6563}}=2M_o,$$

care certifică prezenţa în probă a nucleelor de deuteriu.

Aplicarea teoriei lui Bohr la studiul ionilor hidrogenoizi se face imediat prin înmulţirea lui λ din (7.12) cu numărul de ordine Z, ceea ce ne conduce la setul de expresii analoage expresiilor (7.26) şi (7.35), anume:

$$a)\quad r_n(Z) = a\,\frac{n^2}{Z}$$

(7.39) $$b)\quad E_n(Z) = -E_H\,\frac{Z^2}{n^2}$$

$$c)\quad \tilde{\nu}_{nm}(Z) = Z^2 R_o\left(1-\frac{m_o}{M}\right)\left[\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right]$$

unde a este raza Bohr (7.27), $E_H = -E_1 = \frac{m_o}{8}\left(\frac{e^2}{\varepsilon_o h}\right)^2$ este valoarea absolută a energiei stării fundamentale a atomului de H, iar M este masa nucleului ionului hidrogenoid considerat $\left(H_e^+,\ Li^{++},\ etc.\right)$. Si în acest caz, al ionilor hidrogenoizi, teoria lui Bohr a repurtat un succes remarcabil. Astfel, pentru He^+ $M = 4M_o$ şi formula (7.39.c) prevede pentru $n=3$ ($m=4,5,...$) numerele de undă ale seriei Fowler, minuţios verificate experimental de Paschen şi Bartels, iar pentru $n=4$ ($m=5,6,...$) oferă numerele de undă ale seriei Pickering (din vizibil) prevăzută de acesta încă din 1905, prin analogie cu seria Balmer a hidrogenului.

II.8. Invarianţii adiabatici ai mişcării. Generalizarea condiţiei Bohr de cuantificare

După cum am văzut, plecând de la premisa că în atom nu mai sunt valabile legile fizicii clasice, Niels Bohr extinde într-o manieră remarcabilă valabilitatea ipotezelor cuantice, introduse de Planck şi Einstein, la nivelul sistemului atomic, prin impunerea celor două postulate şi a relaţiei de cuantificare ce-i poartă numele, reuşind astfel, "dintr-o singură lovitură", să elimine insuficienţele modelului Rutherford şi să realizeze o concordanţă deosebită între noul model atomic şi principiul de combinare Rydberg-Ritz.

Din acest punct de vedere, teoria elaborată de Niels Bohr constituie

cu adevărat al treilea pas fundamental în dezvoltarea teoriei cuantelor.

Din celălalt punct de vedere, al eficienţei fizico-matematice, teoria este desigur incompletă, dar are meritul de a fi semnalat pentru prima oară necesitatea şi posibilitatea generalizării cantitativ-concrete, de "punere în ecuaţie", a ipotezelor cuantelor de energie şi radiaţie, cuprinse elocvent în originala condiţie Bohr de cuantificare. Prin intermediul ei, teoria lui Bohr, ca primă teorie cuantică a atomului, scoate în relief semnificaţia profundă a deosebirilor ce există între legităţile clasice, bazate pe variaţii continue ale mărimilor fizice ce caracterizează mişcarea, şi legităţile cuantice care permit, în anumite condiţii, numai variaţii în salturi ale aceloraşi mărimi.

Analiza teoretică de anvergură a acestor deosebiri va începe imediat după publicarea articolului lui Bohr şi va cunoaşte un prim succes doi ani mai târziu, în 1915, când Max Planck, William Wilson şi în special Arnold Sommerfeld obţin, aproape simultan, expresiile generalizate corespunzătoare relaţiei Bohr de cuantificare, adică ceea ce numim astăzi condiţiile semiclasice de cuantificare. In esenţă, această analiză a fost amorsată de necesitatea elucidării următoarelor două aspecte:

- Primul, de ordin oarecum formal (dar numai la prima vedere), se referă la faptul că atât ipoteza lui Planck $\varepsilon_n = nh\nu$, cât şi relaţia de cuantificare formulată de Bohr $K_n = nh$, au în vedere două sisteme fizice particulare, anume oscilatorul liniar armonic şi respectiv ionul hidrogenoid cu orbite electronice staţionare circulare. Se pune întrebarea dacă există vreo posibilitate, şi dacă da, cum?, de obţinere a unor relaţii de cuantificare general valabile la nivel microscopic.
- Al doilea, de ordin principial şi în strânsă legătură cu primul, este reprezentat de problema descrierii corecte a comportării unui atom supus acţiunii unui câmp exterior cu variaţie temporală continuă şi suficient de lentă. Această problemă este generată de faptul că, din punct de vedere clasic, variaţia continuă a câmpului perturbator ar trebui să producă o variaţie continuă a mărimilor fizice ce caracterizează mişcarea electronului în atom, ori, din punct de vedere cuantic şi după cum se observă experimental, câmpul considerat sau nu schimbă starea electronului sau îl obligă să treacă prin salt la o altă

stare permisă. Mai mult decât atât, privind deosebirea faţă de concepţia clasică, dacă variaţia în timp a câmpului perturbator este suficient de lentă, cea de a doua alternativă, anume a tranziţiei, nu se va realiza deloc.

Din ceea ce se ştie în istoria fizicii, primul care s-a ocupat de dezvoltarea acestei probleme prin elaborarea unei teorii elevate, dar din păcate preponderent clasice, a fost Paul Ehrenfest, care a pornit de la ideea simplă şi foarte eficientă cum avea să demonstreze Sommerfeld câţiva ani mai târziu, că între clasic şi cuantic în fizica teoretică din acea perioadă, trebuia să existe "undeva" o punte de legătură [39, 41]. Sub aspect logic, centrul de forţă al ideii lui Ehrenfest era următorul:

dacă în cazul unui atom, supus acţiunii unui câmp exterior cu variaţie temporală foarte lentă, nu sunt induse tranziţii între stările staţionare vecine, atunci, în virtutea principiului euristic, care afirmă continuitatea actului de cunoaştere, ar trebui să existe şi la nivelul descrierii clasice o serie de mărimi, asociate direct sistemului considerat, care să rămână constante, cel puţin în cadrul aproximaţiei permise de variaţia temporală foarte lentă, sub acţiunea câmpului perturbator.

Confirmarea existenţei şi identificarea acestor mărimi, denumite invarianţi adiabatici, este efectuată de Paul Ehrenfest prin formularea principiului adiabatic şi elaborarea teoriei invarianţilor adiabatici, care vor juca un rol hotărâtor în realizarea tranziţiei cognitive de la clasic la cuantic, adică în formularea condiţiilor semiclasice de cuantificare.

Deoarece discuţia noastră de acum face subiectul doar al unui paragraf dintr-un capitol de început al unei cărţi de Mecanică Cuantică, nu credem că este cazul, nefiind nici timp nici spaţiu, să insistăm, cu toată rigurozitatea care ar fi necesară, asupra detaliilor fizico-matematice ale teoriei lui Ehrenfest. In cele ce urmează, vom arăta că în mecanica clasică există invarianţi adiabatici şi vom stabili legătura acestora cu mişcările multi-periodice nedegenerate, iar în final vom formula condiţiile semiempirice de cuantificare.

Fie aşadar un sistem fizic conservativ, cu f grade de libertate, caracterizat de hamiltonianul $H(x^a, p_a)$, unde $\{(x^a, p_a)\}_{a=\overline{1,f}}$ reprezintă cele 2f

variabile canonice conjugate. Considerăm prin ipoteză, că acest sistem execută o mişcare f-periodică de libraţie nedegenerată, adică, în fiecare din subspaţiile fazice $\left\{F^2\left(x^a,\ p_a\right)\right\}_{a=\overline{1,f}}$ (bidimensionale) traiectoria fazică este o curbă închisă pe care proiecţia punctului figurativ $\left(x^a,\ p_a\right)_{a=\overline{1,f}}$ din spaţiul fazic 2f-dimensional $F^{2f}(x,p)$ o parcurge în mod repetat cu perioada $\left\{T_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$, toate cele f perioade fiind diferite de la un subspaţiu fazic bidimensional $F^2\left(x^c,\ p_c\right)$ la altul $F^2\left(x^d,\ p_d\right)$.

Să presupunem acum că la momentul $t=0$ asupra sistemului începe să acţioneze un câmp perturbator a cărui evoluţie este caracterizată de funcţia $\lambda(t)$: $\mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$. Dacă variaţia câmpului perturbator, deci în speţă a funcţiei $\lambda(t)$, se face mult mai lent decât cea mai lentă dintre mişcările pe "sub"-traiectoriile fazice din $\left\{F^2\left(x^a,\ p_a\right)\right\}_{a=\overline{1,f}}$ atunci, considerând $T_{(s)} = \sup\left\{T_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$ vom putea dezvolta în serie Taylor funcţia $\lambda(t)$ şi oprindu-ne la primii doi termeni avem

$$(8.1) \qquad \lambda\left(t+T_{(s)}\right) = \lambda(t) + \frac{d\lambda}{dt}T_{(s)},$$

de unde rezultă pentru câmpul perturbator următoarea condiţie de variaţie adiabatică

$$(8.2) \qquad T_{(s)}\left|\frac{d\lambda}{dt}\right| < \lambda .$$

Cum $T_{(s)}$ este cea mai mare dintre toate perioadele $\left\{T_a\right\}_{a=\overline{1,f}}$, rezultă că această condiţie (8.2), dacă este satisfăcută pentru $T_{(s)}$, atunci va fi automat satisfăcută pentru oricare altă perioadă T_a, adică

$$(8.3) \qquad T_a\left|\frac{d\lambda}{dt}\right| < \lambda \qquad ,a=\overline{1,f}.$$

O asemenea variabilă lentă, cum este λ, a fost denumită de către Paul

Ehrenfest variabilă adiabatică.

Sub acţiunea câmpului perturbator, sistemul considerat va fi caracterizat de hamiltonianul $\underline{H}\left(x^a, p_a; \lambda\right)$, care va prezenta o variaţie temporală prin intermediul variabilei adiabatice $\lambda(t)$, de ecuaţiile de mişcare:

$$a)\quad \dot{x}^a = \frac{\partial \underline{H}}{\partial p_a}$$

(8.4) $\qquad a=\overline{1,f}$

$$b)\quad \dot{p}_a = -\frac{\partial \underline{H}}{\partial x^a}$$

şi de energia totală la momentul t

(8.5) $\quad E(t) = \underline{H}\left(x^c, p_c; \lambda(t)\right) \quad , \quad c=\overline{1,f}.$

Din (8.5) obţinem pentru valoarea medie, în raport cu perioada $T_a(a\text{-}fixat)$, a variaţiei energiei totale, expresia

$$(8.6)\quad <\frac{dE}{dt}>_a = \frac{1}{T_a}\int_t^{t+T_a}\frac{dE}{dt}dt = \frac{1}{T_a}\int_t^{t+T_a}\left[\frac{\partial \underline{H}}{\partial x^c}\dot{x}^c + \frac{\partial \underline{H}}{\partial p_c}\dot{p}_c + \frac{\partial \underline{H}}{\partial \lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}\right]dt,$$

care, prin utilizarea ecuaţiilor canonice (8.4), devine

$$(8.7)\quad T_a <\frac{dE}{dt}>_a = \int_t^{t+T_a}\frac{\partial \underline{H}}{\partial \lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}\cdot dt,$$

unde simbolul "$\underline{a}$" indică lipsa sumării după indicele "a" chiar dacă acesta se repetă. Deoarece pentru "a" fixat obţinem ecuaţia canonică (8.4.a)

$$(8.8)\quad dt = \left(\partial \underline{H}/\partial p_a\right)^{-1}\cdot dx^a,$$

rezultă că ecuaţia (8.7) se poate scrie sub forma

$$(8.9)\quad \oint_{\Gamma_a}\frac{dx^a}{\partial \underline{H}/\partial p_a}\cdot <\frac{dE}{dt}>_a = \oint_{\Gamma_a}\frac{\partial \underline{H}/\partial \lambda}{\partial \underline{H}/\partial p_a}\cdot\frac{d\lambda}{dt}\cdot dx^a,$$

în care integralele sunt calculate pe traiectoria închisă Γ_a din spaţiul

B.C.U. „M. EMINESCU" IAŞI FIZICA

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$F^2\left(x^a,\ p_a\right)$, descrisă de proiecţia $\left(x^a(t),\ p_a(t)\right)$ a punctului figurativ într-un ciclu complet de variaţie cu perioada T_a. In continuare, pentru a prelucra rezultatul (8.9), vom aplica următorul artificiu: deoarece în subspaţiul fazic $F^2\left(x^a,\ p_a\right)$ restul variabilelor canonic conjugate $\{(x^c,p_c)\}$ cu $c=1,..,a-1,a+1,..,f$ sunt constante, vom explicita, din (8.5), impulsul p_a în funcţie de coordonata x^a, energia E şi variabila adiabatică λ, privite toate ca variabile independente, adică

(8.10) $p_a = p_a\left(x^a,E,\lambda\right)$,

ceea ce ne permite să rescriem (8.5) sub forma

(8.11) $H\left(x^a,\ (x^c,p_c),\ p_a(x^a,E,\lambda);\lambda\right) = E$,

cu $c=1,..,a-1,a+1,..,f$.

Derivând (8.11) în raport cu variabila adiabatică λ, obţinem

(8.12) $$\frac{\partial H}{\partial p_a}\cdot\frac{\partial p_a}{\partial \lambda} + \frac{\partial H}{\partial \lambda} = 0$$

şi derivând, de asemenea (8.11) în raport cu energia E, avem

(8.13) $$\frac{\partial H}{\partial p_a}\cdot\frac{\partial p_a}{\partial E} = 1,$$

de unde rezultă expresiile:

(8.14) $$\frac{\partial H/\partial \lambda}{\partial H/\partial p_a} = -\frac{\partial p_a}{\partial \lambda}\ ;\ \frac{\partial H}{\partial p_a} = \left(\frac{\partial p_a}{\partial E}\right)^{-1}.$$

Utilizând (8.14) în ecuaţia (8.9), aceasta poate fi adusă la următoarea formă

(8.15) $$\oint_{\Gamma_a}\left[\frac{\partial p_a}{\partial E}<\frac{dE}{dt}>_a + \frac{\partial p_a}{\partial \lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}\right]\cdot dx^a = 0.$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

In cazul aproximaţiei adiabatice, dezvoltarea în serie Taylor a energiei totale, la momentul $t+T_a$ ne oferă relaţia

$$E(t+T_a)-E(t) = T_a \cdot \frac{dE}{dt},$$

din care obţinem, pentru media variaţiei energiei totale, următoarea expresie

$$<\frac{dE}{dt}>_a = \frac{1}{T_a}\int_t^{t+T_a} \frac{dE}{dt}\,dt = \frac{E(t+T_a)-E(t)}{T_a} = \frac{dE}{dt},$$

care aduce ecuaţia (8.15) la forma

$$(8.16)\quad \oint_{\Gamma_a}\left[\frac{\partial p_a}{\partial E}\cdot\frac{dE}{dt} + \frac{\partial p_a}{\partial \lambda}\cdot\frac{d\lambda}{dt}\right]\cdot dx^a = 0.$$

După cum se observă imediat, aceasta exprimă de fapt legea de "conservare"

$$(8.17)\quad \frac{d}{dt}\oint_{\Gamma_a} p_a\,dx^a = 0,$$

adică <u>integrala de fază</u>

$$(8.18)\quad J_a = \oint_{\Gamma_a} p_a dx^a$$

este <u>un invariant adiabatic</u> ce reprezintă, sub aspect geometric, aria suprafeţei delimitate de $p_a(x^a;E,\lambda)$ şi x^a în subspaţiul fazic $F^2(x^a,p_a)$, corespunzătoare modului T_a al mişcării f-periodice nedegenerate.

Să revemin la mişcarea f-periodică nedegenerată <u>conservativă</u>, de hamiltonian $H(x^c,p_c)$, pentru care vom presupune că ecuaţia Hamilton-Jacobi

$$(8.19)\quad H\left(x^c, \frac{\partial S}{\partial x^c}\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

este complet separabilă, adică admite soluţia

$$(8.20)\quad S(x,t;E,\alpha_2,..,\alpha_f) = \sum_{a=1}^{f} W_a(x^a;E,\alpha_2,..,\alpha_f) - Et,$$

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde $\{W_a\}_{a=\overline{1,f}}$ reprezintă termenii de descompunere ireductibilă a acţiunii reduse:

$$(8.21)\quad W(x;E,\alpha_2..\alpha_f) = \sum_{a=1}^{f} W_a(x^a;E,\alpha_2..\alpha_f).$$

In raport cu termenii $\{W_a\}_{a=\overline{1,f}}$ ai acţiunii reduse, cele f integrale de fază, de tipul (8.18), se exprimă prin relaţiile

$$(8.22)\quad J_a(E,\alpha_2,..\alpha_f) = \oint_{\Gamma_a} \frac{\partial W_a}{\partial x^a}\, dx^a\ ,\ a=1,2,..,f,$$

care permit explicitarea, în sens invers, a constantelor $(E,\alpha_2..\alpha_f)$

$$(8.23)\quad \begin{aligned} E &= E(J_1,..,J_f)\\ \alpha_2 &= \alpha_2(J_1,..,J_f)\\ &\cdots\\ \alpha_f &= \alpha_f(J_1,..,J_f). \end{aligned}$$

Prin intermediul relaţiilor (8.23), acţiunea redusă (8.21) se aduce la forma

$$(8.24)\quad W = \sum_{a=1}^{f} W_a(x^a;\ J_1..J_f),$$

care practic "amorsează" unul dintre cele mai elegante formalisme din Mecanica Analitică, anume formalismul "unghi-variabilă de acţiune", care permite determinarea frecvenţelor unui sistem, fără a rezolva problema mişcării sistemului (este vorba evident, de cazul mişcărilor multiperiodice). In cadrul acestui formalism, integralele de fază $\{J_a\}_{a=\overline{1,f}}$, denumite şi variabile de acţiune, sunt considerate drept noile impulsuri generalizate, iar acţiunea redusă (8.24) este interpretată ca funcţie generatoare a transformării canonice complete

$$(8.25)\quad x^a = x^a(\chi^c,\ J_c)\ \ ;\ \ p_a = p_a(\chi^c,\ J_c)\ \text{ cu }\ a,c=\overline{1,f},$$

în care $\{\chi^a\}_{a=\overline{1,f}}$ reprezintă noile coordonate generalizate, denumite unghiulare,

BCU CLUJ-NAPOCA UNIVERSITY LIBRARY

privite ca variabile canonice asociate impulsurilor generalizate $\{J_a\}_{a=\overline{1,f}}$, adică variabilelor de acţiune. Din exprimarea invariantului integral Poincaré-Cartan de ordinul I, în raport cu cele două sisteme $(x^a,p_a)_{a=\overline{1,f}}$, $(\chi^c,J_c)_{c=\overline{1,f}}$ de variabile canonice

$$(8.26)\quad \oint \left[p_a dx^a - H(x,p)\,dt\right] = \oint \left[J_c d\chi^c - \tilde{H}(\chi,J)\,dt\right]\ ;\quad a,c=\overline{1,f}$$

obţinem (în urma unei transformări Legendre de funcţie generatoare W [66])

$$(8.27)\quad p_a dx^a - H(x,p)dt = -\chi^c dJ_c - \tilde{H}(\chi,J)dt + \frac{\partial W}{\partial x^a}dx^a + \frac{\partial W}{\partial J_a}dJ_a$$

din care rezultă imediat următoarele expresii importante

$$(8.28)\quad p_a = \frac{\partial W}{\partial x^a}\ ;\ \chi^a = \frac{\partial W}{\partial J_a}\ ;\ H(x,p) = \tilde{H}(\chi,J).$$

Cea de a doua relaţie din (8.28) ne arată cum sunt asociate "unghiurile" $\{\chi^a\}_{a=\overline{1,f}}$ variabilelor de acţiune $\{J_a\}_{a=\overline{1,f}}$, iar cea de a treia relaţie ne spune că, în cazul sistemului fizic conservativ, hamiltonianul $\tilde{H}$ în noile variabile(χ,J) coincide (nu şi ca formă matematică explicită) cu hamiltonianul H, în variabilele canonic conjugate (x,p).

Acum intervine cea mai importantă trăsătură a formalismului "unghi-variabilă de acţiune"

după cum se observă din (8.23), energia totală E depinde numai de variabilele de acţiune şi, sistemul fiind conservativ, adică $E=H(x,p)$, rezultă din a treia ecuaţie (8.28), că

$$E(J) = \tilde{H}(\chi,J)$$

adică, hamiltonianul sistemului în noile variabile canonice este independent de unghiurile $\{\chi^a\}_{a=\overline{1,f}}$ deci, $\tilde{H}=\tilde{H}(J)$.

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

In aceste condiţii, integrarea ecuaţiilor canonice:

$$(8.29)\quad \dot{\chi}^a = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial J_a}\ ;\ \dot{J}_a = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi^a} \equiv 0\ ,\ a=\overline{1,f}$$

este imediată şi oferă soluţiile:

$$(8.30)\quad \text{a)}\quad \chi^a(t) = \nu^a(J_1 \ldots J_f)t + \delta^a$$

$$\text{b)}\quad J_a(t) = (const.)_a \qquad a=\overline{1,f}$$

$$\text{c)}\quad \nu^a(J) = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial J_a} \equiv \frac{\partial \tilde{E}(J)}{\partial J_a},$$

unde setul de constante $\{\nu^a\}_{a=\overline{1,f}}$ reprezintă spectrul de frecvenţe al mişcării f-periodice nedegenerate a sistemului fizic conservativ, iar mărimile $\{\delta^a\}_{a=\overline{1,f}}$, numite constante de fază, se determină din condiţiile iniţiale. Pentru a ne convinge de faptul că ν^a reprezintă frecvenţa mişcării pe traiectoria închisă Γ_a, să calculăm variaţia "unghiului" χ^a la o parcurgere completă a curbei Γ_a, adică

$$(8.31)\quad \Delta\chi^a = \oint_{\Gamma_a} \frac{\partial \chi^a}{\partial x^a}\, dx^a .$$

Utilizând în (8.31) primele două relaţii din (8.28), rezultă

$$(8.32)\quad \Delta\chi^a = \oint_{\Gamma_a} \frac{\partial}{\partial x^a}\left[\frac{\partial W}{\partial J_a}\right] dx^a = \frac{\partial}{\partial J_a}\left[\oint \frac{\partial W}{\partial x^a} dx^a\right] = \frac{\partial}{\partial J_a}\left[\oint_{\Gamma_a} p_a dx^a\right],$$

ceea ce înseamnă, având în vedere relaţia de definiţie (8.22) a variabilelor de acţiune,

$$(8.33)\quad \Delta\chi^a = \frac{\partial J_a}{\partial J_a} \equiv 1.$$

Dar, variaţia lui χ^a pe curba Γ_a poate fi estimată direct din (8.30.a) deoarece, între momentele t şi $t+T_a$, avem

(8.34) $\Delta\chi^a = \chi^a(t+T_a) - \chi^a(t) \equiv \nu^a \cdot T_a$.

Din (8.33) şi (8.34), rezultă într-adevăr

(8.35) $\nu^a = \dfrac{1}{T_a}$.

Referitor la aspectele matematice şi fizice prezentate până acum, în cadrul acestui paragraf, se poate trage următoarea concluzie:

în cazul mişcărilor multiperiodice nedegenerate există "f" invarianţi adiabatici, care sunt variabilele de acţiune $\{J_a\}_{a=\overline{1,f}}$, iar variabilele unghiulare $\{\chi^a\}_{a=\overline{1,f}}$ variază cu 1 în decursul fiecărei perioade $\{T_a\}_{a=\overline{1,f}}$, frecvenţele corespunzătoare $\{\nu^a\}_{a=\overline{1,f}}$ putând fi determinate direct din relaţia (8.30.c), adică

$$\nu^a = \frac{\partial E(J)}{\partial J_a}.$$

Prin utilizarea invarianţilor adiabatici $\{J_a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi a formulei (8.30.c) din formalismul "unghi-variabilă de acţiune", obţinerea relaţiilor de cuantificare, dacă avem în vedere că acestea trebuie să aibă o formă generală, dar, în acelaşi timp, să redea faptele cunoscute, se va putea face deosebit de simplu, considerând, de exemplu, cazul oscilatorului liniar armonic. Pentru acest sistem conservativ cu un singur grad de libertate, avem următoarea formă redusă a ecuaţiei Hamilton-Jacobi

(8.36) $$\frac{1}{2m_o}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E,$$

din care rezultă pentru variabila de acţiune $J(E)$ expresia

(8.37) $$J(E) = \oint \frac{\partial W(x;E)}{\partial x}\,dx = \oint \left[2m_o\left(E - \frac{1}{2}kx^2\right)\right]^{1/2} dx.$$

Cu ajutorul substituţiei

(8.38) $x = \sqrt{\frac{2E}{k}} \cdot \sin\theta$

obţinem, din (8.37),

(8.39) $J(E) = 2E\sqrt{\frac{m_o}{k}} \int_0^{2\pi} \cos^2\theta \, d\theta = 2\pi\sqrt{\frac{m_o}{k}} E$

de unde rezultă pentru energia $E(J)$ şi frecvenţa $\nu(J)$, expresiile :

(8.40)

a) $E(J) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_o}} \cdot J$

b) $\nu = \frac{\partial E}{\partial J} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m_o}}$.

Ori, ştim din ipoteza lui Planck următoarea relaţie de cuantificare a energiei oscilatorului liniar armonic

(8.41) $E_n = nh\nu$ cu $n \in N^*$,

presupunând că alegem originea energiei E pentru valoarea zero a lui ν. Prin înlocuirea rezultatelor (8.40) în relaţia de cuantificare dată de Planck, obţinem

(8.42) $J = nh$,

adică, invariantul adiabatic al mişcării oscilatorului liniar armonic este un multiplu întreg al constantei lui Planck. In plus, dacă privim direct relaţia (8.42), observăm că aceasta, prin însăşi forma ei, nu mai conţine nici o referire la sistemul fizic iniţial pentru care a fost obţinută, cu excepţia faptului că sistemul posedă un singur grad de libertate. Rezultă atunci, ca deosebit de naturală, ipoteza generalizării relaţiei (8.42) la toate modurile de acţiune ale unui singur sistem fizic conservativ cu mişcare multiperiodică, ceea ce ne conduce la vestitele condiţii semiclasice de cuantificare

(8.43) $J_a = \oint p_a \, dx^a = n_a h$,

obţinute sub această formă de Arnold Sommerfeld în anul 1915, şi la semnificaţia fizică a constantei lui Planch, de cuantă de acţiune.

II.9. Modelul atomic nerelativist Bohr-Sommerfeld-Wilson

Inainte de a trece la prezentarea modelului cuantic al ionilor hidrogenoizi, elaborat de Arnold Sommerfeld şi William Wilson, prin impunerea condiţiilor semiclasice de cuantificare integralei complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi pentru sistemul conservativ cu configuraţie geometrică planetară, să obţinem, prin intermediul acestei metode analitice de tip semiclasic, modelul atomic formulat de Bohr. In acest caz, orbitele fiind traiectorii de rază constantă, iar mişcarea având caracter nerelativist, hamiltonianul sistemului este dat de expresia

$$(9.1)\qquad H = \frac{1}{2m_o r^2}\left[P_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}P_\varphi^2\right] - \frac{\lambda}{r},\ \text{cu}\ \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o}$$

unde:

$$(9.2)\qquad P_\theta = m_o r^2\,\dot{\theta}\quad,\quad P_\varphi = m_o r^2 \sin^2\theta\,\dot{\varphi}$$

sunt impulsurile canonic conjugate coordonatelor sferice unghiulare $\{\theta,\varphi\}$. Orientând axele referenţialului astfel încât orbita circulară de rază r să fie cuprinsă în planul ecuatorial (xOy), adică

$$(9.3)\qquad \theta = \frac{\pi}{2}\quad,\quad \dot{\theta} = 0,$$

obţinem pentru hamiltonianul (9.1) şi impulsurile (9.2) expresiile:

$$(9.4)\qquad \text{a)}\quad H = \frac{1}{2m_o r^2}P_\varphi^2 - \frac{\lambda}{r}$$

$$\text{b)}\quad P_\varphi = m_o r^2\dot{\varphi},$$

care ne conduc la următoarea formă redusă a ecuaţiei Hamilton-Jacobi

$$(9.5)\qquad \frac{1}{2m_o r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \varphi}\right)^2 - \frac{\lambda}{r} = E,$$

BCU IASI CENTRALA UNIVERSITARA LIBRARY

de unde obţinem, printr-o simplă cuadratură după φ, expresia integralei complete

$$(9.6)\qquad S(r,\varphi,t;E) = \varphi\left[2m_o r^2\left(E+\frac{\lambda}{r}\right)\right]^{1/2} - Et.$$

După cum se observă, acţiunea (9.6) conţine o singură constantă E, deşi depinde atât de coordonata azimutală φ, cât şi de cea radială r. Această inadvertenţă este aparentă, deoarece sistemul considerat este supus legăturii bilaterale scleronome şi finite

$$(9.7)\qquad r = const. \;\leftrightarrow\; P_r = m_o\dot{r} \equiv 0 \quad , \quad r\in(0,\infty).$$

Din relaţia de definiţie a impulsului radial în raport cu acţiunea completă

$$P_r = \frac{\partial S}{\partial r},$$

rezultă, prin utilizarea expresiei (9.6), următoarea formă a ecuaţiei legăturii (9.7)

$$(9.8)\qquad P_r = \left[\frac{2m_o}{E+\frac{\lambda}{r}}\right]^{1/2}\cdot\left(E+\frac{\lambda}{2r}\right)\cdot\varphi \equiv 0,$$

care trebuie să fie satisfăcută (din punct de vedere clasic) de coordonata radială r, pentru orice valoare a energiei E, şi a coordonatei unghiulare φ, astfel încât obţinem

$$(9.9)\qquad r(E) = -\frac{\lambda}{2E}.$$

Din (9.9) şi (9.6), rezultă imediat expresia corectă a integralei complete a ecuaţiei Hamilton-Jacobi în cazul mişcării planare, nerelativiste, a electronului, pe traiectorii circulare în câmpul coulombian al nucleului

$$(9.10)\qquad S(\varphi,t;E) = \varphi\left[-\frac{m_o\lambda^2}{2E}\right]^{1/2} - Et.$$

In această etapă, impunerea relaţiei Sommerfeld-Wilson

$$\oint P_\varphi d\varphi = nh$$

BCU ASCENDENTAL UNIVERSITY LIBRARY

conduce direct la rezultatele fundamentale ale teoriei Bohr. In adevăr, din relaţia de definiţie

$$P_\varphi = \frac{\partial S}{\partial \varphi}$$

şi expresia (9.10) a acţiunii rezultă forma concretă a condiţiei de cuantificare

$$2\pi\sqrt{-\frac{m_o\lambda^2}{2E}} = nh$$

din care obţinem spectrul valorilor permise ale energiei

$$(9.11)\quad E_n = -\frac{2m_o e^4}{(8\pi\varepsilon_o\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}\quad;\quad \hbar=\frac{h}{2\pi}\ ,\ n=1,2,3,..$$

şi apoi, din (9.9), razele orbitelor staţionare corespunzătoare

$$(9.12)\quad r_n = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{n^2}{Z}.$$

Pornind de la faptul că, din nici un puncte de vedere, clasic sau cuantic, nu există un motiv fundamental de restricţionare apriorică a mişcării electronului în atom la cazul orbitelor staţionare circulare, Sommerfeld şi Wilson generalizează, în 1915, independent unul de altul, modelul formulat de Bohr şi elaborează prima teorie cuantică a ionului hidrogenoid cu orbite electronice kepleriene şi nivele energetice multiplu degenerate.

In cazul nerelativist şi în absenţa restricţionării de rază constantă a traiectoriei planare a electronului în câmpul coulombian al nucleului de sarcină Ze, presupus suficient de masiv pentru a fi practic imobil în originea referenţialului inerţial, lagrangeianul sistemului este dat de expresia binecunoscută

$$(9.13)\quad L = \frac{m_o}{2}\left[\dot r^2 + r^2\dot\varphi^2\right] + \frac{\lambda}{r}\quad,\quad \lambda=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o},$$

în care $\left(r,\ \theta=\frac{\pi}{2},\ \varphi\right)$ sunt coordonatele sferice, iar triedrul este astfel orientat încât traiectoria electronului este cuprinsă în planul ecuatorial. Pentru funcţia

lui Hamilton şi pentru cele două impulsuri canonic conjugate (P_r, P_φ) se obţin imediat expresiile

$$\text{a)} \quad H = \frac{1}{2m_o}\left[P_r^2 + \frac{1}{r^2}P_\varphi^2\right] - \frac{\lambda}{r}$$

(9.14)

$$\text{b)} \quad P_r = m_o\dot{r} = \frac{\partial S}{\partial r}$$

$$\text{c)} \quad P_\varphi = m_o r^2\dot{\varphi} = \frac{\partial S}{\partial \varphi},$$

astfel încât ecuaţia Hamilton-Jacobi are forma concretă

$$\text{(9.15)} \quad \frac{1}{2m_o}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)^2\right] - \frac{\lambda}{r} = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

şi este complet separabilă, adică

$$\text{(9.16)} \quad S(r,\varphi,t;K,E) = F(r;K,E) + \Phi(\varphi;K,E) - Et.$$

Inlocuind (9.16) în (9.15), obţinem

$$\text{(9.17)} \quad r^2\left(\frac{dF}{dr}\right)^2 + \left(\frac{d\Phi}{d\varphi}\right)^2 = 2m_o r^2\left(E + \frac{\lambda}{r}\right)$$

de unde rezultă

$$\text{a)} \quad P_r = \frac{dF}{dr} = \pm\left[2m_o E + \frac{2m_o\lambda}{r} - \frac{K^2}{r^2}\right]^{1/2}$$

(9.18)

$$\text{b)} \quad P_\varphi = \frac{d\Phi}{d\varphi} = K.$$

Astfel, relaţiile semiclasice de cuantifire, pentru cele două moduri de acţiune J_1, J_2 corespunzătoare gradelor de libertate radial-azimutale, capătă forma explicită

BCU IAŞI / CENTRUL UNIVERSITY LIBRARY

a) $$J_1 = \oint P_r dr = 2\int_{r_1}^{r_2} \left[2m_o E + \frac{2m_o\lambda}{r} - \frac{K^2}{r^2} \right]^{1/2} \cdot dr = n_1 h$$

(9.19)

b) $$J_2 = \oint P_\varphi d\varphi = 2\pi K = n_2 h, \quad ; \quad n_1, n_2 \in \mathbb{N}$$

în care cele două limite de integrare din (9.19.a) reprezintă rădăcinile ecuaţiei algebrice $P_r = 0$, adică

(9.20) $$r_{1,2} = -\frac{\lambda}{2E}\left[1 \pm \left(1 + \frac{2EK^2}{m_o\lambda^2} \right)^{1/2} \right].$$

Deoarece pentru mişcarea finită a electronului în câmpul coulombian al nucleului este satisfăcut în orice moment lanţul de inegalităţi

(9.21) $$0 < r_1 \le r \le r_2$$

rezultă din (9.20) că energia totală este negativă, adică

(9.22) $$E = -|E|,$$

ceea ce de altfel era de aşteptat în cazul stărilor electronice legate. Introducând (9.22) în (9.19.a) şi utilizând notaţiile

(9.23) $$\alpha = 2m_o|E| \quad ; \quad \beta = m_o\lambda \quad ; \quad \gamma = K^2,$$

vom calcula integrala de fază

(9.24) $$J_1 = 2\int_{r_1}^{r_2} \left[-\alpha + 2\beta\frac{1}{r} - \gamma\cdot\frac{1}{r^2} \right]^{1/2} \cdot dr$$

prin aplicarea următorului artificiu. Interpretând (9.24) ca o integrală dependentă de parametrul γ, să o derivăm în raport cu acesta:

(9.25) $$\frac{\partial J_1}{\partial\gamma} = -\frac{1}{\sqrt{\gamma}} \int_{\rho_1=\frac{1}{r_1}}^{\rho_2=\frac{1}{r_2}} \left[\frac{\beta^2}{\gamma} - \alpha - \left(\frac{\beta}{\sqrt{\gamma}} - \sqrt{\gamma}\rho \right)^2 \right]^{-1/2} \cdot d\left(\frac{\beta}{\sqrt{\gamma}} - \sqrt{\gamma}\rho \right) ; \quad \rho = \frac{1}{r},$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică

$$(9.26)\quad \frac{\partial J_1}{\partial \gamma} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}\left\{\arccos\left[\frac{\beta/\sqrt{\gamma}-\sqrt{\gamma}/r_2}{\sqrt{\frac{\beta^2}{\gamma}-\alpha}}\right] - \arccos\left[\frac{\beta/\sqrt{\gamma}-\sqrt{\gamma}/r_1}{\sqrt{\frac{\beta^2}{\gamma}-\alpha}}\right]\right\}.$$

Cu ajutorul notaţiilor (9.23), expresiile coordonatelor radiale "de întoarcere" devin

$$(9.27)\quad r_{1,2} = \frac{\beta}{\alpha} \mp \left(\frac{\beta^2}{\alpha^2}-\frac{\gamma}{\alpha}\right)^{1/2}$$

şi astfel obţinem, prin înlocuire în (9.27), expresia

$$(9.28)\quad \frac{\partial J_1}{\partial \gamma} = -\frac{\pi}{\sqrt{\gamma}}.$$

Prin integrarea după γ, în (9.28), rezultă integrala de fază

$$(9.29)\quad J_1 = I(\alpha,\beta) - 2\pi\sqrt{\gamma},$$

în care vom impune, pentru determinarea integralei $I(\alpha,\beta)$, condiţia de "continuitate" în $\gamma=0$, adică

$$(9.30)\quad \left[J_1(\alpha,\beta,\gamma)\right]_{\gamma=0} = 2\int_{[r_1]_{\gamma=0}}^{[r_2]_{\gamma=0}} \left[-\alpha+\frac{2\beta}{r}\right]^{1/2}\cdot dr = I(\alpha,\beta),$$

deci

$$(9.31)\quad I(\alpha,\beta) = 2\int_{[r_1]_{\gamma=0}}^{[r_2]_{\gamma=0}} \left[-\alpha+\frac{2\beta}{r}\right]^{1/2}\cdot dr,$$

unde, după cum rezultă din (9.27), pentru $\gamma=0$, avem

$$(9.32)\quad [r_1]_{\gamma=0} = 0 \;;\; [r_2]_{\gamma=0} = 2(\beta/\alpha).$$

Utilizând substituţia

$$tg\chi = \left[2\frac{\beta}{\alpha}\cdot\frac{1}{r}-1\right]^{1/2}$$

(9.33)

$$r = \frac{2(\beta/\alpha)}{1+tg^2\chi} = 2\frac{\beta}{\alpha}\cos^2\chi$$

integrala definită (9.31) devine

$$(9.34)\quad I(\alpha,\beta) = \frac{8\beta}{\sqrt{\alpha}}\int_0^{\pi/2}\sin^2\chi\, d\chi$$

şi are deci valoarea

$$(9.35)\quad J_1 = 2\pi\lambda\left[\frac{m_o}{2|E|}\right]^{1/2} - 2\pi K = n_1 h.$$

De aici rezultă, având în vedere relaţia (9.19.b) de cuantificare a modului azimutal de acţiune, setul valorilor permise ale energiei ionului hidrogenoid în cadrul modelului nerelativist Bohr-Sommerfeld-Wilson

$$(9.36)\quad E_n = -\frac{m_o e^4}{32(\pi\varepsilon_o\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}\ ,\quad n=n_1+n_2\in\mathbb{N}^*.$$

In cele ce urmează, vom discute mai în detaliu aspectele legate de degenerarea nivelelor energetice (9.36). Pentru aceasta, să revenim la ecuaţiile (9.18) şi la forma de principiu a integralei complete (9.16) pentru a determina traiectoriile clasice ale electronului din care vom selecţiona apoi, prin relaţiile de cuantificare (9.18.b) şi (9.36), orbitele electronice staţionare. Astfel, din (9.18.a), rezultă "termenul radial" al acţiunii

$$(9.37)\quad F(r) = \int_{r_1}^{r}\left[2m_oE + \frac{2m_o\lambda}{r} - \frac{K^2}{r^2}\right]^{1/2}\cdot dr$$

iar, din (9.18.b), "termenul azimutal"

$$(9.38)\quad \Phi(\varphi) = K\varphi$$

care, înlocuiţi în (9.16), conduc la forma acţiunii complete

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(9.39)\quad S(r,\varphi,t;K,E) = \int_{r_1}^{r}\left[2m_oE + \frac{2m_o\lambda}{r} - \frac{K^2}{r^2}\right]^{1/2}\cdot dr + K\varphi - Et.$$

In baza Teoremei Jacobi, familia traiectoriilor clasice se obţine prin integrarea ecuaţiei

$$(9.40)\quad \frac{\partial S}{\partial K} = -\varphi_o \quad , \quad \varphi_o = const.$$

care, având în vedere integrarea completă (9.39), ia forma concretă

$$(9.41)\quad \int_{r_1}^{r} \frac{d\left[\left(\frac{m_o\lambda}{K}-\frac{K}{r}\right)\cdot\left(\frac{m_o^2\lambda^2}{K^2}+2m_oE\right)^{-1/2}\right]}{\left\{1-\left[\left(\frac{m_o\lambda}{K}-\frac{K}{r}\right)\cdot\left(\frac{m_o^2\lambda^2}{K^2}+2m_oE\right)^{-1/2}\right]^2\right\}^{1/2}} = \varphi-\varphi_o.$$

De aici rezultă, prin determinarea primitivei şi aplicarea formulei Leibniz-Newton, cu r_1 dat de (9.20), ecuaţia familiei de traiectorii

$$\arcsin\left[\frac{1-\frac{K^2}{m_o\lambda}\cdot\frac{1}{r}}{\sqrt{1+\frac{2EK^2}{m_o\lambda^2}}}\right] = \varphi-\varphi_o-\frac{\pi}{2}$$

adică

$$(9.42)\quad \frac{1}{r} = \frac{m_o\lambda}{K^2}\cdot\left[1+\left(1+\frac{2K^2E}{m_o\lambda^2}\right)^{1/2}\cos(\varphi-\varphi_o)\right].$$

Aşa cum era de aşteptat, câmpul nucleului fiind coulombian, ecuaţia (9.42) reprezintă exprimarea în formă polară a ecuaţiei conicelor de parametru

$$(9.43)\quad p = \frac{K^2}{m_o\lambda}$$

şi excentricitate

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

(9.44) $$\varepsilon = \left[1+\frac{2K^2E}{m_o\lambda^2}\right]^{1/2}.$$

Deoarece în baza observaţiei (9.22), rezultată din (9.20) şi (9.21), energia totală este negativă, rezultă din relaţia (9.44) că excentricitatea acestor traiectorii este pozitiv-subunitară deci orbitele clasice ale electronului în atom formează o familie 3-parametric-continuă $\mathscr{E}\,(p(K);\ \varepsilon(K,E);\ \varphi_o)$ de elipse confocale în originea $r=0$, unde este nucleul, având semiaxele date de expresiile:

(9.45)
$$a = \frac{p}{1-\varepsilon^2} = \frac{\lambda}{2|E|}$$
$$b = a\sqrt{1-\varepsilon^2} = \frac{K}{\sqrt{2m_o|E|}}.$$

Selecţionarea din familia traiectoriilor clasice $\mathscr{E}\,(p(K);\ \varepsilon(K,E);\ \varphi_o)$ a orbitelor electronice staţionare, corespunzătoare fiecare în parte câte unei stări cuantice permise, se face direct, prin înlocuirea în ecuaţiile (9.42)-(9.45) a valorilor permise (9.18.b), (9.36) ale momentului cinetic orbital K şi ale energiei totale E. Se obţin astfel expresiile:

a) $$\frac{1}{r} = \frac{m_o e^2}{4\pi\varepsilon_o\hbar}\left[1+\left(1-\frac{n_2^2}{n^2}\right)^{1/2}\cdot\cos(\varphi-\varphi_o)\right]\cdot\frac{Z}{n_2^2}$$

(9.46) b) $$p = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{n_2^2}{Z}\ ;\ \varepsilon = \sqrt{1-\left(\frac{n_2}{n}\right)^2}\quad \text{cu}\quad n=n_1+n_2\in\mathbb{N}^*$$

c) $$a = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{n^2}{Z}\ ;\ b = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{nn_2}{Z},$$

cu ajutorul cărora putem discuta concret degenerarea nivelelor energetice staţionare, evidenţiată teoretic pentru prima oară de Sommerfeld şi Wilson,

BIBLIOTECA UNIVERSITARA

în cadrul acestui model.

Să ne ocupăm pentru început, mai în detaliu, de problema valorilor permise pentru numerele cuantice n_1, n_2 şi n, despre care până acum nu am spus aproape nimic. In primul rând, observăm din relaţia (9.20) că trebuie să fie satisfăcută condiţia

$$\frac{1}{|E|} \geq \frac{2K^2}{m_o \lambda^2}$$

care se mai poate scrie

$$2\pi\lambda \left[\frac{m_o}{2|E|}\right]^{1/2} \geq 2\pi |K| .$$

De aici rezultă imediat, prin utilizarea ei în relaţia (9.35), că

(9.47) $n_1 \geq 0$,

deci într-adevăr, numărul "n_1", denumit <u>număr cuantic radial, aparţine mulţimii</u> $\mathbb{N}$. In al doilea rând, tot din (9.35) rezultă

$$\lambda \left[\frac{m_o}{2|E|}\right]^{1/2} = n_1 \hbar + K > 0$$

adică

(9.48) $n_1 \hbar + K = (n_1 + n_2)\hbar = n\hbar > 0$,

ceea ce înseamnă că <u>numărul cuantic principal</u> n <u>aparţine mulţimii numerelor naturale</u> $\mathbb{N}^*$. In (9.48) n este strict mai mare decât zero deoarece valoarea $n=0$ conduce, prin înlocuire în expresia (9.36), la o energie totală infinită în valoare absolută, ceea ce este absurd atât din punct de vedere clasic cât şi cuantic. In fine, din faptul că $n_1 \in \mathbb{N}$, $n \in \mathbb{N}^*$ iar semiaxa b este pozitiv definită, rezultă că:

numărul "n_2", notat prin tradiţie cu "k" şi denumit <u>număr cuantic azimutal</u>, este de asemenea <u>natural</u>, fiind însă restricţionat la submulţimea $\{ 1,2,3,...,n \} \in \mathbb{N}$ după cum se observă din expresia (9.46.b) a excentricităţii

sau, în mod echivalent, din (9.46.c) prin faptul că $a \leq b$. In spectroscopie, ca şi în Mecanica Cuantică, se utilizează în locul numărului azimutal k, un alt număr cuantic l, denumit <u>număr cuantic secundar</u> şi definit prin relaţia

(9.49) $l = k-1$.

Rezumând cele spuse cu privire la problema domeniului de valori ale numerelor cuantice introduse de modelul Bohr-Sommerfeld-Wilson, putem afirma următoarele:

(i) Cuantificarea stărilor energetice ale ionului hidrogenoid este dată <u>numai de numărul cuantic principal</u> n, care poate lua valorile

$$n = 1,2,3,...$$

(ii) Pentru <u>o valoare dată</u> n a numărului cuantic principal, numerele cuantice <u>azimutal</u> şi respectiv <u>secundar</u> pot lua valorile

$$k = 1,2,3,...,n$$

(9.50)

$$l = 0,1,2,...,n-1$$

(iii) Numărul cuantic radial n_1, cu valori în $\mathbb{N}$, se poate calcula de fiecare dată prin relaţia

$$n_1 = n-k = n-l-1.$$

Din relaţia (9.50) şi expresiile (9.36) şi (9.46), observăm că unui <u>nivel energetic dat</u>

$$E_n = -\frac{2m_o e^4}{(8\pi\varepsilon_o\hbar)^2}\cdot\frac{Z}{n^2}$$

îi corespund un număr de n <u>orbite electronice staţionare</u>, eliptice confocale, <u>cu semiaxele mari de aceeaşi valoare</u>

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{n^2}{Z}$$

şi semiaxele mici diferite

$$b = \frac{4\pi\varepsilon_o\hbar^2}{m_o e^2}\cdot\frac{n}{Z}(l+1) \quad , \quad l = 0,1,2,...,n-1.$$

In terminologia curentă a Mecanicii Cuantice, fenomenul prin care unei valori proprii a energiei îi corespund mai multe stări proprii ale sistemului poartă numele de degenerare, iar gradul degenerării este dat de numărul stărilor cu aceeaşi valoare proprie a energiei. Evident, gradul degenerării este mai mare decât 1 şi în plus se poate arăta că starea fundamentală este întotdeauna nedegenerată. In aceeaşi manieră cu modelul Bohr, teoria elaborată de Sommerfeld şi Wilson utilizează numărul cuantic principal la notarea păturilor $K(n=1)$, $L(n=2)$, $M(n=3)$, etc. dar prevede în mod remarcabil existenţa subpăturilor electronice $s(l=0)$, $p(l=1)$, $d(l=2)$, $f(l=3)$,, etc. care structurează fiecare pătură după cum urmează : *Ks*; *Ls*, *Lp*; *Ms*, *Mp*, *Md*; *Ns*, *Np*, *Nd*, *Nf*; etc. Deşi sub alte aspecte, de exemplu cuantificarea spaţială, modelul Bohr-Sommerfeld-Wilson nu oferă rezultate în deplină concordanţă cu cele experimentale, el constituie totuşi primul model cuantic al structurii în subpături a atomului.

II.10. Teoria lui Sommerfeld asupra contribuţiei efectelor relativiste la structura fină a ionilor hidrogenoizi

In urma unei analize mai generale a sistemelor atomice cu un singur electron pe orbită, Arnold Sommerfeld demonstrează că aceastea vor prezenta degenerare dacă sunt îndeplinite următoarele două condiţii:

(i) electronul se deplasează sub acţiunea câmpului central care este pur coulombian;

(ii) masa electronului este absolut constantă.

Cum în al doilea deceniu al secolului XX spinul şi momentul magnetic propriu erau încă necunoscute, nu existau motive teoretice de luare în considerare a unor interacţiuni suplimentare în ionul hidrogenoid, pe lângă cea datorată câmpului coulombian al nucleului, astfel încât prima condiţie de apariţie a degenerării era satisfăcută. In schimb, despre a doua condiţie se ştia în mod cert că este încălcată din cauza variaţiei relativiste a masei cu viteza. Având în vedere acest aspect, Arnold Sommerfeld elaborează teoria relativistă a stărilor staţionare ale electronului într-un câmp coulombian şi evidenţiază existenţa structurii fine a spectrului datorată ridicării complete (de origine relativistă) a degenerării.

Lucrând în coordonate sferice şi alegând originea referenţialului în nucleul considerat punctual şi imobil, vom avea pentru lagrangeianul relativist al sistemului următoarea expresie

$$(10.1)\quad L = -m_o c^2\left[1-\frac{1}{c^2}\left(\dot r^2+r^2\dot\theta^2+r^2\sin^2\theta\ \dot\varphi^2\right)\right]^{1/2}+\frac{\lambda}{r}\ ,\quad \lambda=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o},$$

în care m_o este masa de repaus a electronului, c - viteza luminii în vid, iar "." simbolizează derivarea în raport cu timpul universal t. Evident,

$$(10.2)\quad v^2=\dot r^2+r^2\dot\theta^2+r^2\sin^2\theta\ \dot\varphi^2$$

reprezintă pătratul modulului vectorului 3-dimensional al vitezei. Din (10.1) şi (10.2) rezultă imediat expresiile impulsurilor canonic conjugate coordonatelor "generalizate" (r,θ,φ), anume:

$$(10.3)\quad P_r=m\dot r\ ;\quad P_\theta=mr^2\dot\theta\ ;\quad P_\varphi=mr^2\sin^2\theta\ \dot\varphi$$

unde

$$(10.4)\quad m=\frac{m_o}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$$

este masa de mişcare a electronului. Deoarece, în coordonate sferice, în raport cu baza ortonormală $\{\vec u_r,\ \vec u_\theta,\ \vec u_\varphi\}$, componentele 3-vectorului impuls mecanic au forma:

(10.5) $p_r = m\dot{r}$; $p_\theta = mr\dot{\theta}$; $p_\varphi = mr\sin\theta\,\dot{\varphi}$

rezultă, prin utilizarea relaţiilor (10.3), posibilitatea exprimării acestor componente în raport cu impulsurile canonice $\{P_r, P_\theta, P_\varphi\}$, adică:

(10.6) $p_r = P_r$; $p_\theta = \frac{1}{r}P_\theta$; $p_\varphi = \frac{1}{r\sin\theta}P_\varphi$.

Relaţia impuls-energie, dată de Einstein, împreună cu expresiile (10.6), ne conduc, pe o cale simplă şi foarte directă, la obţinerea ecuaţiei Hamilton-Jacobi. Astfel, sistemul fiind conservativ, energia totală relativistă

(10.7) $\mathcal{E} = c\left[\left(p_r^2+p_\theta^2+p_\varphi^2\right) + m_o^2c^2\right]^{1/2} - \frac{\lambda}{r}$

se identifică cu hamiltonianul, prin înlocuirea componentelor impulsului mecanic cu impulsurile generalizate corespunzătoare şi rezultă

(10.8) $H = c\left[P_r^2 + \frac{1}{r^2}P_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}P_\varphi^2 + m_o^2c^2\right]^{1/2} - \frac{\lambda}{r} = \mathcal{E}.$

Exprimând energia totală relativistă $\mathcal{E}$ prin intermediul energiei de repaus m_oc^2 şi a energiei totale (în sens clasic) E, adică

(10.9) $\mathcal{E} = m_oc^2 + E,$

putem aduce ecuaţia (10.8) la forma

$$P_r^2 + \frac{1}{r^2}P_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}P_\varphi^2 = \left(\frac{E}{c} + \frac{\lambda}{cr} + m_oc\right)^2 - m_o^2c^2,$$

din care rezultă imediat ecuaţia acţiunii reduse $W(r,\theta,\varphi)$ a sistemului

(10.10)
$$\left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \theta}\right)^2+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial W}{\partial \varphi}\right)^2 =$$
$$= 2m_oE\left(1+\frac{1}{2}\frac{E}{m_oc^2}\right)+2m_o\lambda\left(1+\frac{E}{m_oc^2}\right)\cdot\frac{1}{r}+\frac{\lambda^2}{c^2}\cdot\frac{1}{r^2}.$$

Orientând reperul astfel încât planul mişcării electronului să coincidă cu planul

ecuatorial $\theta=\frac{\pi}{2}$, ecuaţia (10.10) devine

$$(10.11)\quad \left(\frac{\partial W}{\partial r}\right)^2+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial W}{\partial \varphi}\right)^2=2m_oE\left(1+\frac{1}{2}\frac{E}{m_oc^2}\right)+2m_o\lambda\left(1+\frac{E}{m_oc^2}\right)\frac{1}{r}+\frac{\lambda^2}{c^2}\cdot\frac{1}{r^2},$$

deoarece, în acest caz

$$(10.12)\quad \frac{\partial W}{\partial \theta}=P_\theta=mr^2\dot{\theta}\equiv 0.$$

Ecuaţia (10.11) fiind complet separabilă, căutăm acţiunea redusă sub forma

$$(10.13)\quad W(r,\varphi;K,E)=F(r;K,E)+\Phi(\varphi;K)$$

şi obţinem următorul sistem de ecuaţii diferenţiale ordinare:

$$(10.14)\quad a)\quad \frac{dF}{dr}=\pm\left[2m_oE\left(1+\frac{1}{2}\frac{E}{m_oc^2}\right)+2m_o\lambda\left(1+\frac{E}{m_oc^2}\right)\cdot\frac{1}{r}-\left(K^2-\frac{\lambda^2}{c^2}\right)\frac{1}{r^2}\right]^{1/2}$$

$$b)\quad \frac{d\Phi}{d\varphi}=K,$$

în raport cu care condiţiile semiclasice de cuantificare se scriu:

$$(10.15)\quad a)\quad J_1=2\int_{r_1}^{r_2}\left[-A+\frac{2B}{r}-\frac{C}{r^2}\right]^{1/2}dr=n_1h\ ,\ n_1\in\mathbb{N}$$

$$b)\quad J_2=2\pi K=n_2h\leftrightarrow K=n_2\hbar\ ,\ n_2\in\mathbb{N}^*$$

constantele A, B şi C fiind date de relaţiile

$$A = m_o|E|\left(2-\frac{|E|}{m_oc^2}\right)$$

(10.16) $$B = m_o\lambda\left(1-\frac{|E|}{m_oc^2}\right)$$

$$C = K^2-\left(\frac{\lambda}{c}\right)^2,$$

în care am ţinut seama că pentru stările legate energia este negativă, deci $E=-|E|$. Integrala de fază (10.15.a) având aceeaşi formă cu integrala (9.24), obţinem din (9.29) şi (9.34) rezultatul

(10.17) $$\frac{B}{\sqrt{A}}-\sqrt{C}=n_1\hbar,$$

care conduce, prin utilizarea relaţiilor (10.16), (10.15.b), la ecuaţia energiei electronului în modelul Sommerfeld

(10.18) $$\frac{\lambda}{c\hbar}\cdot\frac{1-\frac{|E|}{m_oc^2}}{\left[\frac{|E|}{m_oc^2}\left(2-\frac{|E|}{m_oc^2}\right)\right]^{1/2}}=n_1+n_2\left[1-\left(\frac{\lambda}{c\hbar}\right)^2\cdot\frac{1}{n_2^2}\right]^{1/2}.$$

Inspectând forma ecuaţiei (10.18), observăm că pentru rezolvarea ei sunt recomandabile notaţiile:

(10.19) a) $$\frac{\lambda}{c\hbar}=\alpha Z$$

b) $$\frac{|E|}{m_oc^2}=\mu$$

c) $$n_1+n_2\left[1-\left(\frac{\alpha Z}{n_2}\right)^2\right]^{1/2}=N.$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Numărul

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o c\hbar} = 1/137{,}0359895(61) \tag{10.20}$$

reprezintă constanta universală a structurii fine şi are o semnificaţie fizică cu mult mai profundă decât s-ar părea la prima vedere, ea fiind constanta adimensională fundamentală a electrodinamicii cuantice şi caracterizează tăria interacţiunii electromagnetice. Utilizând notaţiile (10.19), ecuaţia (10.18) se aduce la forma ecuaţiei de gradul II

$$\mu^2 - 2\mu + \frac{(\alpha Z/N)^2}{1+(\alpha Z/N)^2} = 0, \tag{10.21}$$

a cărei rădăcină fizic acceptabilă are expresia

$$\mu = 1 - [1+(\alpha Z/N)^2]^{-1/2},$$

din care rezultă formula relativistă a energiei stărilor permise

$$|E| = m_o c^2 \left\{ 1 - \left[1 + \left(\frac{\alpha Z}{N} \right)^2 \right]^{-1/2} \right\}. \tag{10.22}$$

Datorită formei explicite a funcţiei $N(n_1, n_2, \alpha Z)$, legea de dependenţă a energiei totale $-|E|$ de numerele cuantice n_1, n_2 este destul de complicată. Să verificăm mai întâi dacă expresia (10.22) respectă principiul euristic prin reducerea, în limita nerelativistă, la formula (9.36) a energiei în modelul Bohr-Sommerfeld-Wilson. Presupunând îndeplinită condiţia

$$(\alpha Z)^{2k} \ll 1 \quad , \quad k=2,3,... \tag{10.23}$$

expresia (10.22) se scrie

$$|E| \simeq m_o c^2 \left[1 - 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{2N^2} \right] = \frac{m_o c^2 (\alpha Z)^2}{2N^2}, \tag{10.24}$$

iar funcţia $N(n_1, n_2, \alpha Z)$, în limita aceleaşi aproximaţii, devine

$$N \simeq n \left[1 - \frac{(\alpha Z)^2}{2nn_2} \right] \quad ; \quad n = n_1 + n_2. \tag{10.25}$$

Din (10.25) şi (10.23) rezultă

$$\frac{1}{N^2} \simeq \frac{1}{n^2}\left[1+\frac{(\alpha Z)^2}{nn_2}\right],$$

ceea ce conduce, prin înlocuire în (10.24), la expresia (9.36),

$$E_n^{(0)} = -\frac{2m_o e^4}{(8\pi\varepsilon_o\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2} + O\left[(\alpha Z)^{2k}\right]_{k\geq 2} \tag{10.26}$$

a energiei stărilor staţionare în cazul nerelativist. Analiza efectuată scoate în evidenţă, pe lângă corespondenţa de principiu a formulei relativist exacte (10.22) cu formula "nerelativistă" (10.26), încă un aspect fizic deosebit de important şi anume:

> corecţia energetică dominantă indusă de efectele relativiste, denumită şi corecţia relativistă a lui Sommerfeld, este proporţională cu puterea a 4-a a produsului constantei structurii fine cu numărul de ordine al nucleului.

Pentru a obţine forma concretă a corecţiei Sommerfeld, să efectuăm în (10.22) o dezvoltare în serie de puteri după $\zeta=(\alpha Z)^2$, până la termeni în ζ^2 inclusiv. Fie deci funcţiile:

$$f(\zeta) = \left(1+\frac{\zeta}{N^2}\right)^{-1/2} \quad ; \quad N(\zeta) = n_1 + n_2\left(1-\frac{\zeta}{n_2^2}\right)^{1/2} \tag{10.27}$$

care iau în $\zeta=0$ valorile:

$$f(0) = 1 \quad ; \quad N(0) = n_1 + n_2 = n \tag{10.28}$$

şi cu derivatele de ordinul I date de expresiile:

$$\text{a)} \quad \frac{df}{d\zeta} = -\frac{f^3}{2N^2}\left[1+\frac{\zeta}{N(N-n_1)}\right]$$

(10.29)

$$\text{b)} \quad \frac{dN}{d\zeta} = -\frac{1/2}{N-n_1}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care se reduc în $\zeta=0$ la valorile:

$$\text{a)} \quad \left[\frac{df}{d\zeta}\right]_o = -\frac{1}{2n^2} \tag{10.30}$$

$$\text{b)} \quad \left[\frac{dN}{d\zeta}\right]_o = -\frac{1}{2n_2}\,.$$

Pentru derivata de ordinul II a funcţiei $f(\zeta)$ obţinem din (10.29.a)

$$\frac{d^2f}{d\zeta^2} = -\frac{3f^2}{2N^2}\left(\frac{df}{d\zeta}\right)\left[1+\frac{\zeta}{N(N-n_1)}\right] + \frac{f^3}{N^3}\left(\frac{dN}{d\zeta}\right)\left[1+\frac{\zeta}{N(N-n_1)}\right] - \tag{10.31}$$

$$-\frac{f^3}{2N^2}\cdot\frac{1}{N(N-1)} + \frac{\zeta f^3}{2\left[N^2(N-n_1)\right]^2}\cdot\frac{d}{d\zeta}\left[N(N-n_1)\right].$$

Din (10.28), (10.30) şi (10.31) rezultă imediat

$$\left[\frac{d^2f}{d\zeta^2}\right]_o = -\frac{1}{n^4}\left[\frac{n}{n_2}-\frac{3}{4}\right], \tag{10.32}$$

astfel încât, pentru dezvoltarea funcţiei f după puterile lui ζ până la ζ^2 inclusiv, obţinem expresia

$$\left[1+\frac{\zeta}{N^2}\right]^{-1/2} \simeq 1 - \frac{\zeta}{2n^2} - \frac{\zeta^2}{2n^4}\left[\frac{n}{n_2}-\frac{3}{4}\right]. \tag{10.33}$$

Din $\zeta=(\alpha Z)^2$ şi dezvoltarea (10.33) rezultă, prin înlocuire în (10.22), vestita formulă a lui Sommerfeld

$$E_{nl} = -m_o c^2\frac{(\alpha Z)^2}{2n^2}\left[1+\frac{(\alpha Z)^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right)\right], \tag{10.34}$$

în care am utilizat în locul numărului cuantic azimutal $n_2=k$, numărul cuantic secundar $l=0,1,2,\ldots,n-1$, dat de relaţia (9.49). Observând din (10.24)-(10.26) că primul termen din (10.34) reprezintă, aşa cum era de aşteptat, energia $E_n^{(o)}$

BCU IAŞI / FIZICĂ UNIVERSITY LIBRARY

în aproximaţia nerelativistă, formula lui Sommerfeld capătă expresia mai des întâlnită

$$E_{nl} = E_n^{(o)}\left[1+\alpha^2\cdot\left(\frac{Z}{n}\right)^2\cdot\left(\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right)\right] \quad ; \quad E_n^{(o)} = -\frac{m_o e^4}{32(\pi\varepsilon_o\hbar)^2}\cdot\frac{Z^2}{n^2}, \tag{10.35}$$

care scoate în evidenţă forma explicită a corecţiei relativiste a energiei

$$\Delta E_{nl} = -\alpha^2\frac{m_o}{2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o\hbar}\right)^2\cdot\frac{Z^4}{n^4}\left[\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right]. \tag{10.36}$$

Sub aspect cuantic, pe baza oricăreia dintre formulele (10.34)-(10.36), se poate trage următoarea concluzie:

> dinamica relativistă a electronului în câmpul coulombian al nucleului ridică complet degenerarea după numărul cuantic secundar l, adică, pentru orice valoare (naturală) a numărului cuantic principal n, nivelul energetic nerelativist, de energie $E_n^{(o)}$, se despică în n subnivele energetice diferite $\{E_{nl}\}_{l=\overline{0,n-1}}$, date de formula lui Sommerfeld şi corespunzătoare celor n subpături electronice.

Pentru a discuta succint apariţia structurii fine a spectrelor ionilor hidrogenoizi în urma ridicării complete a degenerării după numărul cuantic secundar, să reprezentăm "una lângă alta" diagramele nivelelor energetice în modelul Bohr, Bohr-Sommerfeld-Wilson şi Sommerfeld, pentru atomul de hidrogen:[4]

[4] Subliniem că raţionamentul nostru se referă exclusiv la mişcarea planară a electronului.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

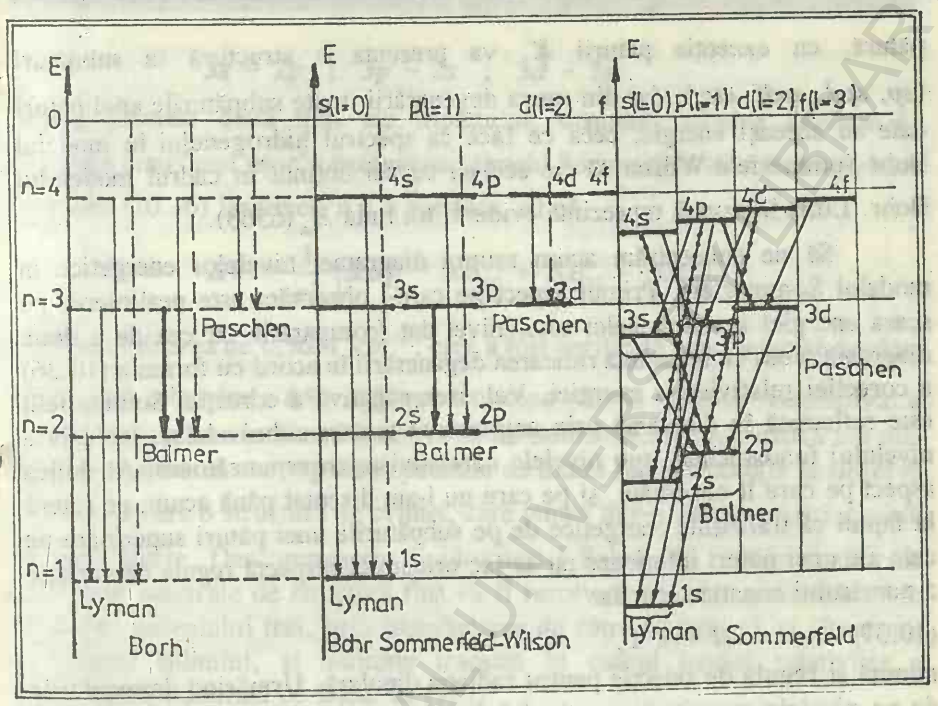


Fig.10.1

Din prima diagramă rezultă, sub aspect calitativ (şi nu numai), aproape tot ceea ce ştiam despre modelul Bohr : atomul are o structură în <u>pături</u> (*K,L,M,N, etc.*) iar radiaţia electromagnetică este emisă în <u>cuante</u> prin tranziţii electronice de pe păturile superioare pe cele inferioare. "Ordonând" aceste tranziţii, aşa cum le-am reprezentat în diagramă, obţinem sistematic liniile seriilor spectrale ale hidrogenului. Linia spectrală îngroşată reprezintă linia H_α a seriei Balmer.

In a doua diagramă sunt codificate trăsăturile esenţiale ale modelului nerelativist, keplerian-semiclasic, al atomului de hidrogen: cu excepţia nivelului fundamental, toate celelalte sunt degenerate iar ordinul degenerării este egal cu numărul cuantic principal, adică cu numărul orbitelor electronice staţionare de aceeaşi semiaxă mare, dar semiaxe mici diferite. Astfel, fiecare

pătură, cu excepţia păturii K, va prezenta o structură în subpături (*sp, spd, spdf, etc.*), dar din cauza degenerării, toate subpăturile unei pături date au aceeaşi energie, ceea ce face ca spectrul hidrogenului în modelul Bohr-Sommerfeld-Wilson să fie acelaşi cu cel obţinut în cadrul modelului Bohr. Linia îngroşată reprezintă evident, tot linia H_α (6563).

Să ne concentrăm acum asupra diagramei nivelelor energetice în modelul Sommerfeld. Primul aspect pe care-l observăm este nealinierea pe scara energiei a subnivelelor unui nivel dat (comparativ cu cea de a doua diagramă) ceea ce înseamnă ridicarea degenerării în acord cu formula (10.36) a corecţiei relativiste a energiei. Valoarea negativă a corecţiei Sommerfeld este reflectată în diagramă prin amplasarea tuturor subnivelelor, inclusiv a nivelului fundamental, sub nivelele nerelativiste corespunzătoare. Al doilea aspect pe care îl observăm, şi pe care nu l-am discutat până acum, se referă la faptul că tranziţiile energetice de pe subpăturile unei pături superioare pe cele ale unei pături inferioare nu se fac oricum ci respectă regula de variaţie a numărului cuantic secundar

$$\Delta l = \pm 1, \tag{10.37}$$

numită şi regula de selecţie pentru radiaţia dipolară. Urmărind dezexcitările de pe nivelele superioare pe nivelul fundamental, constatăm că sub aspect calitativ, nu sunt diferenţe majore între seria Lyman relativistă şi cea nerelativistă.

Trecând însă la analiza seriilor spectrale superioare, observăm că fiecare linie a seriei "nerelativiste", corespunzătoare dezexcitărilor pe nivelul n, se descompune, după teoria lui Sommerfeld, într-un număr de $2n-1$ linii spectrale "relativiste" ale căror numere de undă sunt foarte apropiate de numărul de undă al liniei "iniţiale". Astfel, intuitiv vorbind, spectrul de linii se îndeseşte, adică devine un spectru de structură fină. Din punct de vedere experimental, mai ales în cazul ionilor hidrogenoizi uşori, separarea liniilor din cadrul aceluiaşi multiplet este deosebit de anevoioasă, reclamând mijloace spectroscopice cu putere de rezoluţie foarte mare.

In încheiere, să revenim puţin la diagrama nivelelor energetice în modelul Sommerfeld din care rezultă că linia H_α are o structură de triplet corespunzătoare tranziţiilor:

$$3s \to 2p \;\; ; \;\; 3p \to 2s \;\; ; \;\; 3d \to 2p .$$

Pentru primele două linii ale tripletului, denumite cândva dubletul H_α deoarece erau "mai uşor" observabile, Arnold Sommerfeld calculează pe baza formulei (10.36) lărgimea $\Delta\tilde{\nu}$ a acestuia, adică

$$\Delta\tilde{\nu} = \frac{1}{ch}\left[\Delta E_{31} - \Delta E_{30} + \Delta E_{21} - \Delta E_{20}\right]$$

şi obţine valoarea de 0,3651 cm^{-1}, care a fost verificată experimental de către Michelson obţinând $\Delta\tilde{\nu} = 0{,}32\ cm^{-1}$, ceea ce la vremea respectivă a reprezentat un succes deosebit al teoriei lui Sommerfeld. Insă, câţiva ani mai târziu, cu ajutorul unor aparate spectrale de foarte înaltă rezoluţie se observă că linia H_α are o structură de cvintet, care punea într-o dificultate principială întreaga teorie. Descompunerea liniilor seriei Balmer în multipleţi de câte cinci linii spectrale de structură fină va fi rezolvată pe cale semiempirică la începutul deceniului trei, prin introducerea de către Uhlenbeck şi Goudsmit a ipotezei spinului, şi definitiv tranşată în cadrul teoriei relativiste a electronului elaborată de Dirac în 1927.

Ca o ironie a soartei, dar şi ca un simbol al eforturilor depuse în cunoaşterea microcosmosului, înaintea apariţiei Mecanicii Cuantice, formula lui Sommerfeld redă corect trei dintre cele cinci linii din spectrul de structură fină a lui H_α.

II.11. Efectul Compton

In anul 1895, Wilhelm Conrad Röntgen, studiind descărcările în gaze, observă că, în anumite condiţii de presiune, platinocianura de bariu devine fluorescentă, chiar şi după izolarea radiaţiei ultraviolete emisă de tubul de descărcare. Aceste noi radiaţii, pe care Röntgen nereuşind să le stabilească natura le-a denumit raze X, au primit ulterior numele descoperitorului lor. In 1905, C.G. Barkla, studiind polarizarea radiaţiei X, demonstrează

experimental natura sa electromagnetică, iar trei ani mai târziu, Walter şi Pohl estimează lungimea de undă a acesteia ca fiind de ordinul Ångströmilor.

Experimental, pentru producerea radiaţiilor Röntgen se foloseşte un tub vidat în care electronii emişi de catodul încălzit sunt accelerați către anod, prin aplicarea unei diferenţe de potenţial de ordinul zecilor de kilovolţi. In urma impactului cu anticatodul are loc emisia unei radiaţii foarte penetrante cu un spectru continuu, peste care se suprapune, în anumite condiţii, un spectru de linii numit spectru caracteristic.

Spectrul continuu este rezultatul frânării electronilor în câmpul electric al nucleelor anodului şi prezintă o lungime de undă minimă, dependentă de tensiunea de accelerare U_a după legea

$$(11.1)\quad \lambda_{min}(\text{Å}) = \frac{12{,}4}{U_a(kV)}$$

şi independentă de natura anticatodului.

Spectrul caracteristic apare atunci când tensiunea de accelerare depăşeşte o valoare critică (dependentă de natura anticatodului) fiind alcătuit din linii a căror intensitate poate depăşi de sute de ori intensitatea maximă din spectru continuu.

Deşi din punct de vedere clasic existenţa spectrului continuu putea fi explicată principial, prin considerarea radiaţiei X ca o radiaţie electromagnetică emisă de electronii puternic accelerați prin ciocnirea anticatodului, legea (11.1) şi existenţa spectrului caracteristic (ale cărui linii au lungimile de undă independente de valoarea tensiunii de accelerare) erau inexplicabile.

Din punct de vedere cuantic, soluţia celor două probleme este imediată. Astfel, în cazul spectrului continuu, se poate considera că electronul incident îşi pierde treptat energia în urma ciocnirilor multiple şi aleatorii cu atomii materialului din care este făcut anticatodul; la fiecare ciocnire are loc emisia unui foton a cărui energie este egală cu energia pierdută de electron în acea ciocnire. Cum întregul proces este aleatoriu, rezultă o repartiţie continuă după frecvenţe a intensităţii radiaţiei emise. La limită, este posibil ca electronul incident să-şi piardă întreaga energiei eU_a, într-un singur act de ciocnire, emiţând deci un foton de frecvenţă maximă (pentru o tensiune de accelerare dată)

(11.2) $\nu_{max} = \frac{eU_a}{h}$

adică de lungime de undă minimă

(11.3) $\lambda_{min} = \frac{hc}{eU_a} = \frac{12{,}4}{U_a(kV)}(\text{Å})$.

Deoarece electronul pierde în această ciocnire întreaga sa energie, emisia unor fotoni cu frecvenţă mai mare este practic imposibilă deci, într-adevăr, spectrul continuu prezintă o lungime de undă minimă.

In cazul spectrului discret, Kossel a arătat că existenţa acestuia se datoreşte "reorganizării" electronilor în păturile interioare ale atomilor ciocniţi inelastic de electronii incidenţi,"reorganizări" care sunt însoţite, conform postulatului optic al lui Bohr, de emisia de fotoni cu frecvenţa bine determinată, corespunzătoare diferenţei de energie dintre păturile electronice între care au loc tranziţiile. In cazul anticatozilor realizaţi dintr-un material greu, adică atomii acestuia au un număr de ordine mare, electronii din păturile interioare sunt puternic legaţi şi deci electronul incident trebuie să posede o energie mai mare decât energia păturii pe care se găseşte electronul interior pe care-l va scoate prin ciocnire. Devine clar că spectrul caracteristic nu va apare decât de la valori ale potenţialului de accelerare mai mari decât o valoare critică dependentă de natura materialului din care este făcut anodul. Prin mărirea tensiunii de accelerare, deci a energiei electronilor incidenţi, se produce o creştere a intensităţii liniilor caracteristice, lungimile de undă ale acestora rămânând neschimbate, deoarece, în acord cu formula lui Moseley, ele depind numai de constanta R, de numerele cuantice principale corespunzătoare păturilor interioare între care au loc tranziţiile şi de sarcina efectivă $z=Z-\sigma$ a nucleului atomului ţintă:

(11.4) $\nu = R(Z-\sigma)^2 \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right]$,

unde $m = n+1, n+2,...$, iar pentru $n = 1,2,...$ sunt "emise" seriile caracteristice *K,L, etc.*

In anul 1922, Arthur Holly Compton, studiind experimental difuzia radiaţiei Röntgen prin substanţă, descoperă un efect deosebit de interesant, inexplicabil pe baza concepţiilor clasice, care va fi denumit ulterior efectul Compton şi-i va aduce după numai cinci ani, Premiul Nobel pentru Fizică.

Configuraţia "tip" a experimentelor efectuate de Compton este prezentată în figura 11.1

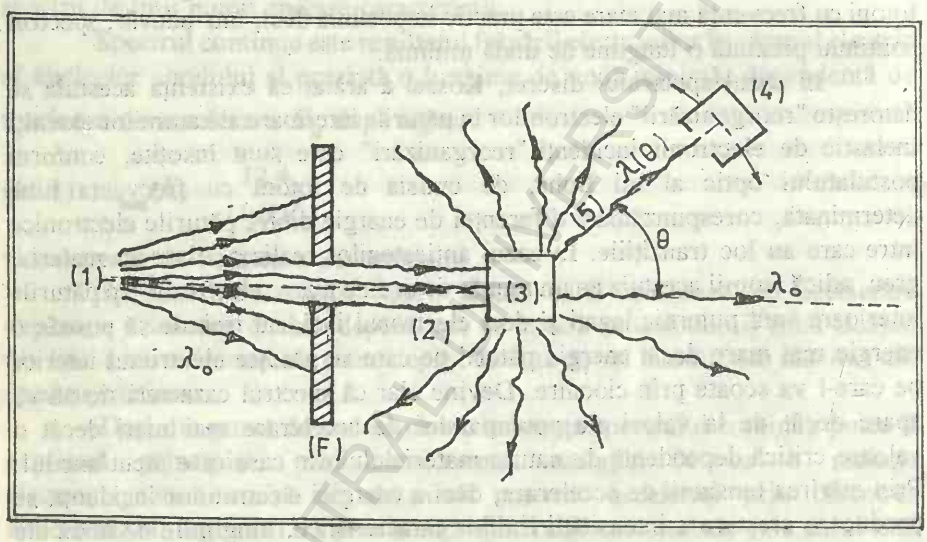


Fig.11.1

Printr-un sistem de fante colimatoare (F), radiaţia X incidentă (1), monocromatică de lungime de undă λ_0, este colimată într-un fascicul îngust (2) care este apoi împrăştiat în toate direcţiile în urma interacţiunii cu ţinta difuzantă (3). In primele sale experienţe Compton a utilizat drept ţintă blocuri de grafit. Studiind cu un spectrometru Röntgen (4) componenţa spectrală a radiaţiei împrăştiate (5) sub diverse unghiuri θ, Compton are surpriza să observă că pe lângă linia λ_0 a radiaţiei incidente apare un satelit "roşu"

$\lambda(\theta) = \lambda_o + \Delta\lambda(\theta)$, cu lungimea de undă dependentă de unghiul de împrăştiere şi cu distanţa spectrală $\Delta\lambda(\theta)$ independentă de lungimea de undă λ_o. Se constată astfel că satelitul dispare pentru $\theta=0$, adică $\Delta\lambda(0)=0$ şi se îndepărtează continuu prin creşterea unghiului θ, atingând o distanţă spectrală maximă la unghiul $\theta=\pi$, adică la împrăştierea înapoi. Din măsurătorile efectuate, Arthur Compton obţine următoarea lege de dependenţă a lungimii de undă a satelitului în raport cu unghiul θ

(11.5) $\lambda(\theta) = \lambda_o + \Lambda_o(1-\cos\theta)$, $\Lambda_o = const. > 0$.

Referitor la intensitatea celor două linii spectrale, sunt puse în evidenţă alte două aspecte imposibil de explicat pe baza legilor difuziei clasice, de tip Rayleigh. In primul rând, pentru orice material al ţintei, intensitatea companionului "roşu" creşte cu creşterea unghiului de difuzie în timp ce intensitatea liniei normale scade în mod continuu până la o valoare minimă corespunzătoare împrăştierii înapoi. Reamintim că teoria lui Rayleigh conduce, pentru intensitatea radiaţiei nepolarizate difuzate sub unghiul θ, la legea

$$I = I_o \left[\frac{e^2/m_o c^2}{r}\right]^2 \cdot \frac{1+\cos^2\theta}{2}$$

din care se observă că, la aceeaşi valoare r a distanţei dintre detector şi centrul difuzant, intensitatea radiaţiei "împrăştiate înapoi" ($\theta=\pi$) este maximă, fiind egală cu intensitatea radiaţiei "împrăştiate înainte" ($\theta=0$).

In al doilea rând, se constată că pentru ţinte realizate din materiale uşoare, *Li, Be, B, C*, intensitatea liniei Compton este mult mai mare decât cea a liniei normale. Pe măsură ce împrăştierea se face pe ţinte din materiale tot mai grele, se observă o scădere a intensităţii liniei Compton şi o creştere corespunzătoare a intensităţii liniei normale, astfel încât, de exemplu în cazul ţintelor din *Al*, intensitatea companionului este puţin mai mare decât cea a liniei λ_o, iar în cazul ţintelor din *Fe, Ni, Cu*, intensitatea liniei normale este

cu mult mai mare decât cea a liniei Compton. Cu alte cuvinte, intensitatea liniei Compton scade odată cu creşterea numărului de ordine Z al atomilor ţintei şi în mod corespunzător creşte intensitatea liniei normale. Tot în cadrul acestei analize, Compton evidenţiază încă o trăsătură esenţială a deplasării spectrale a companionului "roşu":

> la acelaşi unghi de difuzie, valoarea deplasării spectrale $\Delta\lambda$ nu numai că este independentă de lungimea de undă a radiaţiei Röntgen incidente, dar este independentă şi de natura materialului ţintei. Mărind unghiul de difuzie, deplasarea spectrală creşte, în acord cu legea (11.5), cu aceeaşi valoare pentru orice material al ţintei.

In acest fel, Arthur Holly Compton stabileşte experimental că mărimea Λ_o din formula (11.5), denumită ulterior "lungime de undă Compton", se va exprima numai prin intermediul unor constante universale.

II.12. Teoria elementară a efectului Compton

Prima teorie a acestui efect, care la vremea lui a reprezentat "cea mai strălucită confirmare a naturii corpusculare a energiei electromagnetice", a fost elaborată în mod independent, de Arthur Compton şi Petrus-Josefus-Wilhelmus Debye şi dezvoltată ulterior de către Klein şi Nishina, în 1929. In cele ce urmează vom prezenta doar rezultatele obţinute de Compton şi Debye, deoarece perfecţionările aduse de Klein şi Nishina, făcând apel la teoria cuantică a radiaţiei, depăşesc cu mult cadrul acestui tratat.

Ideea eminamente nouă care a făcut posibilă explicarea efectului Compton a constat în generalizarea ipotezei lui Einstein, prin introducerea nu numai a energiei cuantei de radiaţie ci şi impulsului acestuia. Astfel, "punând cap la cap", într-o singură expresie, ipoteza lui Einstein şi formula lui Einstein din Relativitatea Specială, se poate scrie

(12.1) $E = mc^2 = h\nu$,

de unde rezultă, prin împărţire cu viteza luminii, expresia

(12.2) $mc = \frac{h}{\lambda}$,

care nu reprezintă altceva decât modulul vectorului impuls al fotonului

(12.3) $|\vec{p}| = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|$.

Din (12.3) rezultă imediat expresia impulsului cuantei de radiaţie în funcţie de vectorul de undă al acesteia

(12.4) $\vec{p} = \hbar\vec{k}$,

iar pentru energia cuantei de radiaţie exprimată în raport cu pulsaţia acesteia se obţine, din (12.1), relaţia

(12.5) $E = \hbar\omega$.

Evident, în cazul radiaţiei electromagnetice, între pulsaţia ω şi modulul vectorului de undă $\vec{k}$, există relaţia

$$\omega = 2\pi\nu = c\,\frac{2\pi}{\lambda} = c|\vec{k}|$$

adică

(12.6) $|\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$.

Punând la baza teoriei lor relaţiile (12.4) şi (12.5), pentru caracterizarea impulsului şi a energiei cuantei de radiaţie, Compton şi Debye consideră difuzia radiaţiilor X ca un proces de ciocnire elastică între fotonii incidenţi de înaltă energie şi electronii periferici ai atomilor ţintei. Deoarece aceşti electroni periferici au energii de lagătură neglijabile în raport cu energia fotonilor radiaţiei X, ei vor putea fi consideraţi, într-o bună aproximaţie, liberi şi iniţial în repaus. In această situaţie, legile de conservare ale impulsului şi energiei pentru sistemul biparticulă foton-electron au forma:

(12.7)

a) $\hbar\vec{k}_o = \hbar\vec{k} + \vec{p}$

b) $\hbar\omega_o + m_o c^2 = \hbar\omega + \left[c^2\vec{p}^2 + m_o^2 c^4\right]^{1/2}$,

în care $(\hbar\vec{k}_o,\ \hbar\omega_o)$ şi $(\hbar\vec{k},\hbar\omega)$ sunt respectiv impulsul şi energia fotonului incident şi emergent (difuzat), m_o masa de repaus a electronului şi $\vec{p}$ impulsul acestuia după ciocnire. Ecuaţiile (12.7) se mai pot scrie:

$$\text{a)} \qquad \vec{p} = \hbar\left(\vec{k}_o - \vec{k}\right)$$

(12.8)

$$\text{b)} \qquad c^2|\vec{p}|^2 = \hbar^2\left(\omega_o - \omega\right)\left[\omega_o - \omega + 2\frac{m_o c^2}{\hbar}\right].$$

Evaluând în (12.8.a) modulul vectorului 3-dimensional al impulsului electronului, se obţine

$$(12.9) \qquad |\vec{p}|^2 = \hbar^2\left[|\vec{k}_o|^2 + |\vec{k}|^2 - 2\vec{k}_o\cdot\vec{k}\right],$$

adică, având în vedere (12.6),

$$(12.10) \qquad c^2|\vec{p}|^2 = \hbar^2\left[\omega_o^2 + \omega^2 - 2\omega_o\omega\cos\theta\right],$$

unde θ reprezintă unghiul sub care este emis fotonul împrăştiat, în raport cu direcţia $\vec{k}_o/|\vec{k}_o|$ de propagare a fotonului incident. Adunând şi scăzând $2\omega_o\omega$ în membrul drept al ecuaţiei (12.10), rezultă relaţia

$$(12.11) \qquad c^2|\vec{p}|^2 = \hbar^2(\omega_o - \omega)^2 + 2\hbar^2\omega_o\omega(1-\cos\theta),$$

care conduce, prin înlocuire în ecuaţia (12.8.b), la expresia

$$(12.12) \qquad \omega_o\omega(1-\cos\theta) = (\omega_o - \omega)\frac{m_o c^2}{\hbar},$$

adică

$$(12.13) \qquad \frac{\omega_o - \omega}{\omega_o\omega} = \frac{\hbar}{m_o c^2}[1-\cos\theta].$$

Ecuaţia (12.13) se mai poate scrie

$$(12.14) \qquad \frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega_o} = \frac{\hbar}{m_o c^2}[1-\cos\theta],$$

BUJAS / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

de unde rezultă imediat expresia deplasării spectrale a companionului roşu

(12.15) $$\Delta\lambda(\theta) = \frac{h}{m_o c}[1-\cos\theta] \quad ; \quad \Delta\lambda(\theta) = \lambda(\theta) - \lambda_o$$

adică tocmai formula lui Compton (11.5)

(12.16) $$\lambda(\theta) = \lambda_o + \frac{h}{m_o c}(1-\cos\theta).$$

In deplină concordanţă cu rezultatele experimentale prezentate în paragraful anterior, se observă din expresia (12.15) a deplasării Compton, că aceasta este independentă atât de natura materialului ţintei cât şi de lungimea de undă λ_o a radiaţiei incidente, iar din formula (12.16) se obţine valoarea concretă

(12.17) $$\Lambda_o = \frac{h}{m_o c}$$

a lungimii de undă Compton, care se exprimă într-adevăr prin constantele universale h, c şi $m_o = 9{,}1 \cdot 10^{-31}\ kg$.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL III

CARACTERUL ONDULATORIU AL MICROPARTICULELOR

"In jurul anului 1920, noţiunea de dualitate a luminii era deci acceptată. Fenomenele luminoase nu puteau fi interpretate decât dacă se făcea apel pe rând, atât la proprietăţile ondulatorii cât şi la proprietăţile corpusculare ale luminii.

Aproximativ în aceeaşi epocă fusese definitiv adoptată ideea structurii corpusculare a materiei, existenţa atomilor şi moleculelor, şi chiar mai mult, existenţa electronilor şi a nucleelor atomice.[...] Atunci, tânărul fizician Louis de Broglie a formulat o idee îndrăzneaţă şi genială. El şi-a spus că dacă lumina ne apare sub două aspecte, corpuscular şi ondulatoriu, de ce nu ar fi la fel şi cu materia? [...]

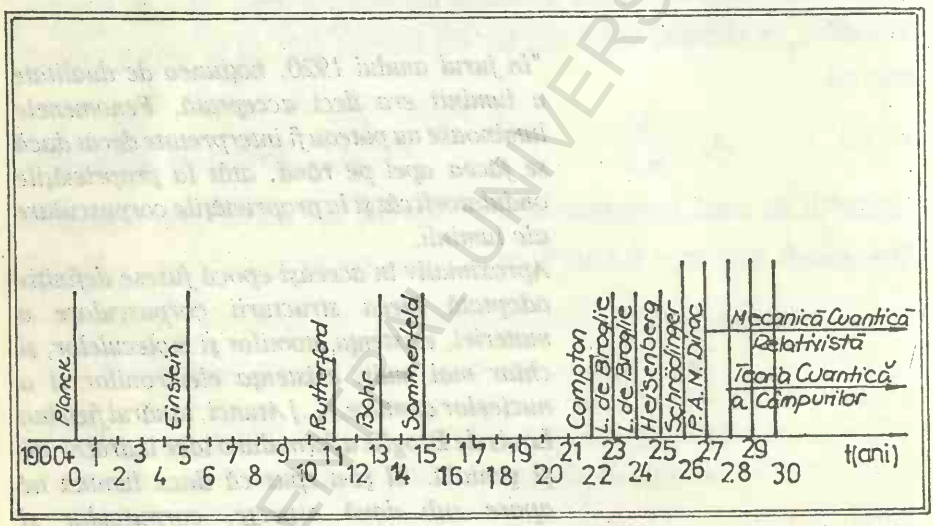
Concepţia îndrăzneaţă a lui Louis de Broglie despre o natură ondulatorie a materiei, care întâmpinase la început destul de mult scepticism, a primit apoi un suport experimental destul de solid şi de convingător. Ea a fost punctul de plecare al unei dezvoltări teoretice efervescente, care avea să se cristalizeze, în câţiva ani, într-o doctrină

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

coerentă numită astăzi [...] mecanică ondulatorie [...]".

Alfred Kastler[1]

Dacă am face o analiză a cronologiei evenimentelor majore care au condus la apariţia şi dezvoltarea teoriei cuantice moderne şi am reprezenta grafic rezultatele, prin analogie cu model de reprezentare a spectrelor atomice; am obţine următorul "spectru de linii temporale":



care exprimă destul de clar "intensitatea şi frecvenţa" celor mai importante contribuţii teoretice la cunoaşterea universului microfizic.

Pentru un cititor neavizat în domeniul fizicii cuantice, dar care a parcurs totuşi capitolul precedent, interpretarea primelor şase linii ale acestui spectru şi a zonelor de "linişte" dintre ele este oarecum evidentă. Ceea ce îl va surprinde aproape cu certitudine este densitatea şi intensitatea ansamblului de linii următoare "liniei Compton" (1922). Cu puţină fantezie,

[1] *Această stranie materie*, Seria *Idei Contemporane*, Editura Politică, Bucureşti, 1982, pg. 88 şi 95.

comparând structura acestei părţi a spectrului de evinemente cu structura spectrală a oricărei serii a atomului de hidrogen, în vecinătatea pragului de ionizare, stimatul cititor va ajunge printr-un raţionament de metasimilaritate la următoarea concluzie esenţială, aflată într-un acord deplin cu conţinutul citatului utilizat ca motto:

> printr-o veritabilă tranziţie cognitivă, de aceeaşi amploare cu cele datorate lui Planck, Einstein, Bohr şi Sommerfeld, Louis-Victor-Pierre-Raymond de Broglie aduce vechea teorie a cuantelor în "zona gnoseologică de ionizare", adică în zona de eliberare definitivă din corsetul reprezentărilor clasice, şi de apariţie, în mai puţin de zece ani, nu numai a Mecanicii Cuantice ci şi a Teoriei Cuantice a Câmpurilor.

Ipotezele de Broglie asupra existenţei şi proprietăţilor undelor asociate particulelor în mişcare prezintă un grad de cutezanţă şi genialitate absolut egal, dacă nu chiar mai mare, celui posedat de ipoteza cuantelor de energie, cuantelor de radiaţie şi de relaţiile de cuantificare Bohr-Sommerfeld. Si am spus, "dacă nu chiar mai mare" nu pentru a face o hiperbolizare "ce din coadă v'a să sune" ci pentru a sublinia că la data formulării lor, spre deosebire de cazul celorlalte trei ipoteze, nu exista nici un experiment care să le reclame şi nimeni până la de Broglie nici nu şi-a pus măcar problema naturii ondulatorii a corpusculilor.

Si pentru că, aşa cum Albert Einstein lăsa adesea să se înţeleagă, un geniu nu are nevoie de avocaţi, el se apără prin însăşi creaţia sa, considerăm că următoarele rânduri, scrise de Louis de Broglie în vara anului 1961, reprezintă cea mai clară introducere în teoria undei asociate particulei în mişcare:

> *"Am reflectat îndelung asupra acestei probleme şi,după diverse studii preliminare, am ajuns în câteva note din toamna anului 1923, apoi, mai detaliat, în teza mea de doctorat, susţinută în noiembrie 1924, la stabilirea unei corelaţii, precise între mişcarea unui corpuscul şi propagarea unei unde, în care intervine constanta lui Planck şi am reuşit să demonstrez că această corelaţie permite să se înţeleagă multe lucruri rămase până atunci foarte misterioase, de exemplu existenţa stărilor staţionare în atomi. Ideile pe care le-am emis atunci au avut*

foarte rapid un succes la care nu îndrăzneam să mă gândesc".[2]

III.1. Unda de Broglie asociată microparticulei libere

Din punct de vedere semantic, este aproape evident că se poate vorbi despre caracterul ondulatoriu al unui corpuscul numai dacă acestuia i se poate asocia o undă ale cărei proprietăţi fundamentale, pulsaţia şi vectorul de undă, sunt consistent racordate, atât sub aspect fizic cât şi sub aspect matematic, la proprietăţile cinematico-dinamice esenţiale ale particulei, anume energia şi impulsul. In cadrul fizicii clasice, o asemenea asociere este practic imposibil de realizat deoarece corpusculul, chiar dacă ar genera, prin mişcarea sa, un set de perturbaţii autoîntreţinute, el va rămâne o entitate perfect localizabilă, în timp ce perturbaţiile produse de acesta se vor răspândi "din aproape în aproape", după toate direcţiile, în tot spaţiul care îl înconjoară. Această deosebire esenţială, din punct de vedere clasic, dintre natura corpusculară şi cea ondulatorie a materiei, nu poate fi eliminată nici dacă s-ar presupune că între corpuscul şi câmpul generat de acesta au loc interacţiuni foarte puternice care draghează particula sursă în sensul de evoluţie a câmpului, deoarece aceste interacţiuni vor avea în permanenţă un caracter local şi vor conduce, conform determinismului kantian, la stabilirea traiectoriei unice a corpusculului care îi va interzice acestuia să se găsească la un moment dat în toate punctele domeniului spaţial acoperit de câmpul său dragor.

Printr-o intuiţie desăvârşită, bazată pe necesitatea respectării invarianţei relativiste şi a ipotezei cuantelor de energie, Louis de Broglie transcede caracterul antagonic al celor două reprezentări şi sintetizează, în contextul novator al teoriei undei asociate, imaginea coexistenţei universale undă-corpuscul [13-15].

El porneşte de la ideea că inclusiv particula în repaus trebuie să aibă o undă asociată. Această premiză are două consecinţe importante:

---

[2] *Certitudinile şi incertitudinile ştiinţei*, Seria *Idei Contemporane*, Editura Politică, Bucureşti, 1980, pg.25.

(i) Atât din punctul de vedere al mecanicii clasice cât şi din cel al electrodinamicii clasice, particula în repaus nu poate emite în spaţiu nici un fel de unde deoarece din valabilitatea generală a legilor de conservare a energiei şi impulsului, pentru sistemul undă+corpuscul, rezultă că energia şi impulsul transportate de câmpul radiat nu pot fi "luate" decât de la sursă, adică nu pot fi obţinute decât prin schimbarea stării de mişcare a particulei. Pe baza acestei observaţii, de Broglie trage o primă concluzie, anume că o unda asociată unei particule în repaus nu poate fi produsă decât printr-un proces oscilatoriu, de origine eminemente cuantică, a cărui frecvenţă proprie este "stabilizată" de energia de repaus a particulei. Aplicând ipoteza lui Planck, se obţine imediat

(1.1) $$\hbar\omega_0 = m_0c^2,$$

adică pulsaţia proprie este

(1.2) $$\omega_0 = \frac{m_0c^2}{\hbar}.$$

(ii) Din caracterul inviolabil al legilor de conservare, rezultă că unda asociată microparticulei în repaus nu poate transporta în spaţiu impuls şi energie, adică nu poate fi o undă progresivă, ceea ce înseamnă că vectorul ei de undă $\vec{k}_0$ trebuie să fie identic zero

(1.3) $$\vec{k}_0 = 0.$$

Din relaţiile (1.2), (1.3) şi din expresia generală a unei unde plane

(1.4) $$\Psi(\vec{r},t) = A\cos(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r}),$$

Louis de Broglie formulează o a doua concluzie esenţială anume că <u>în referenţialul propriu</u> al microparticulei, unda asociată acesteia reprezintă de fapt un <u>câmp coerent</u>

(1.5) $$\Psi(\tau) = A\cos(\omega_0\tau) \quad ; \quad \tau \text{ - timpul propriu,}$$

adică o <u>undă degenerată care oscilează absolut sincron în toate punctele spaţiului.</u> Din (1.2) şi (1.5) rezultă evident forma explicită a <u>undei asociate</u>

particulei în repaus, adică

$$\Psi(\tau) = A\cos\left(\frac{m_0c^2}{\hbar}\tau\right). \tag{1.6}$$

Pasul următor a fost deosebit de simplu. Pentru a stabili expresia undei asociate particulei în mişcare inerţială, cu viteza $\vec{v}$ constantă faţă de referenţialul observatorului în repaus, în raport cu care coordonatele universale sunt (x,y,z,t), de Broglie utilizează în expresia (1.6) relaţia de transformare Lorentz-Einstein pentru coordonatele de gen temporal, τ şi t, adică

$$\tau = \alpha\left(t - \frac{\vec{v}\cdot\vec{r}}{c^2}\right) \quad \text{cu} \quad \vec{r} = x\vec{u}_x + y\vec{u}_y + z\vec{u}_z\,, \quad \alpha = \left[1-\frac{v^2}{c^2}\right]^{-1/2} \tag{1.7}$$

de unde obţine, pentru unda asociată particulei libere, expresia

$$\Psi(\vec{r},t) = A\cos\left[\frac{\alpha m_0c^2}{\hbar}t - \frac{\alpha m_0\vec{v}}{\hbar}\cdot\vec{r}\right]. \tag{1.8}$$

Dar, conform Teoriei Relativităţii Restrânse, mărimile

$$\text{a)} \quad \alpha m_0c^2 = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = E$$

$$\text{b)} \quad \alpha m_0\vec{v} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \vec{p} \tag{1.9}$$

sunt tocmai energia şi impulsul particulei relativiste libere. In aceste condiţii, din expresiile (1.4), (1.8) şi (1.9), rezultă ecuaţiile:

$$\text{a)} \quad \hbar\omega = E$$

$$\text{b)} \quad \hbar\vec{k} = \vec{p}, \tag{1.10}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care reprezintă forma matematică a vestitelor **ipoteze de Broglie**

1) Pulsaţia undei de Broglie este egală cu raportul dintre energia totală relativistă a particulei şi constanta redusă a lui Planck.
2) Vectorul de undă al undei de Broglie este egal cu vectorul tridimensional al impulsului relativist al particulei multiplicat prin inversul constantei reduse a lui Planck.

Utilizând ipotezele de Broglie (1.10) în expresia (1.4), rezultă forma funcţiei de undă de Broglie

$$(1.11)\quad \Psi(\vec{r},t) = A\cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})\right]$$

care, după cum se observă, se reduce în cazul $\vec{p}=0$ la "unda degenerată" (1.5) şi posedă în cazul $\vec{p}\neq 0$ un vădit caracter progresiv.

Deoarece în toată Mecanica Cuantică funcţia de undă este principial complexă, adică

$$\Psi : M_4 \to \mathbb{C}$$

unde M_4 reprezintă spaţiul Minkowski, atunci expresia undei de Broglie asociate particulei libere se scrie sub forma

$$(1.12)\quad \Psi(\vec{r},t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)} \qquad \text{cu} \qquad A \in \mathbb{C}$$

unde faza

$$(1.13)\quad \Phi(\vec{r},t) = \frac{1}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)$$

este astfel definită, încât unda plană (1.12) se propagă în sensul impulsului $\vec{p}$ al particulei.

Determinarea vitezei de propagare a suprafeţei de fază constantă, adică a vitezei de fază, se face imediat, prin intermediul expresiei (1.13), considerând că particula se deplasează, de exemplu, în direcţia axei oz, adică

$$(1.14)\quad \vec{p}\cdot\vec{r} = pz.$$

Din (1.14) şi (1.13) rezultă prin derivare în raport cu timpul

$$(1.15)\quad \frac{d\Phi}{dt} = p\,\frac{dz}{dt} - E = p\cdot u - E$$

de unde se obţine, pentru suprafeţele de fază constantă

$$(1.16)\quad \frac{d\Phi}{dt} = 0$$

expresia vitezei de fază u, a undei de Broglie

$$(1.17)\quad u = \frac{E}{p} \quad \Rightarrow \quad \vec{u} = \frac{E}{p^2}\,\vec{p}$$

care capătă, prin utilizarea relaţiilor (1.9), forma "consacrată"

$$(1.18)\quad u = \frac{c^2}{v} \quad \Rightarrow \quad \vec{u} = \frac{c^2}{v^2}\,\vec{v}.$$

Din expresia (1.18) rezultă că viteza de fază a undelor de Broglie este întotdeauna mai mare sau cel puţin egală cu viteza luminii. Acest aspect nu violează încă teoria relativităţii restrânse deoarece, după cum se cunoaşte din teoria generală a undelor, energia şi impulsul "de radiaţie" sunt transportate de suprafeţele de egală amplitudine şi nu de suprafeţele de fază constantă, ori, întotdeauna, viteza de propagare a suprafeţelor de egală amplitudine este mai mică decât viteza luminii şi poartă denumirea de viteză de grup. Pentru a obţine expresia vitezei de grup a undelor de Broglie şi împreună cu aceasta legile de mişcare a suprafeţelor de egală amplitudine, să considerăm în expresia (1.12) a undei asociate o variaţie infinitezimală $d\vec{p}$, a impulsului particulei, adică

$$(1.19)\quad \Phi(\vec{r},t;\ \vec{p}+d\vec{p}) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}[(\vec{p}+d\vec{p})\vec{r}-E(\vec{p}+d\vec{p})t]}$$

ceea ce revine, prin neglijarea termenilor superiori din dezvoltarea expresiei energiei

$$E(\vec{p}+d\vec{p}) = E(\vec{p}) + \frac{\partial E}{\partial \vec{p}}\cdot d\vec{p} + (\text{termeni de ordin superior în } d\vec{p})$$

la următoarea formă a funcţiei de undă (1.19)

$$(1.20)\quad \Psi(\vec{r},t,\vec{p}+d\vec{p}) = \left[A\, e^{\frac{i}{\hbar}[d\vec{p}\vec{r}-(\nabla_{\vec{p}}E\cdot d\vec{p})t]}\right]\cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-E(\vec{p})t)}$$

care evidenţiază "termenul de modulaţie"

(1.21) $M_{\vec{p}}(\vec{r},t;d\vec{p}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{r}-(\nabla_{\vec{p}}E)t)\cdot d\vec{p}\right] - 1$

şi care are, în cadrul aproximaţiei utilizate, următoarea expresie

(1.22) $M_{\vec{p}}(\vec{r},t;\ d\vec{p}) \cong \frac{i}{\hbar}\left[\vec{r} - t\ \nabla_{\vec{p}}E\right]\cdot d\vec{p}.$

Din forma (1.22) a termenului de modulaţie rezultă imediat că amplitudinea undei modulate (1.20) va avea o valoare constantă, independentă de variaţia infinitezimală $d\vec{p}$, numai de-a lungul liniei de univers $\vec{r}=\vec{r}(t)$ care anulează termenul de modulaţie $M_{\vec{p}}(\vec{r},t;\ d\vec{p})$, adică

(1.23) $\vec{r} = (\nabla_{\vec{p}}E(\vec{p}))t \quad \Leftrightarrow \quad \vec{r} = \vec{v}_g\cdot t.$

Din relaţia impuls-energie formulată de Einstein

(1.24) $E = \sqrt{\left[c^2|\vec{p}|^2 + m_0^2c^4\right]}$

se obţine pentru gradientul energiei în spaţiul impulsurilor, expresia

(1.25) $\nabla_{\vec{p}}E = c^2\frac{\vec{p}}{E}$

cu ajutorul căreia, legea de mişcare (1.23) devine

(1.26) $\vec{r} = \frac{\vec{p}}{E/c^2}t.$

Inlocuind relaţiile (1.9) în ecuaţiile (1.25) şi (1.26) rezultă expresia vitezei de grup $\vec{v}_g$ şi expresia parametrică, "calibrată în origine", a traiectoriei de amplitudine constantă

(1.27)
a) $\vec{v}_g = \vec{v}$

b) $\vec{r}(t) = \vec{v}\cdot t.$

Din punctul de vedere al ipotezelor de Broglie (1.10), semnificaţia relaţiilor (1.27) este cu totul remarcabilă:
Viteza de grup a undei asociate este egală cu viteza particulei

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relativiste în mişcare inerţială, adică unda de Broglie transportă impuls şi energie prin însăşi particula căreia îi este asociată, iar expresia parametrică:

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{v}\cdot(t-t_0)$$

a traiectoriilor de amplitudine constantă reprezintă chiar legea mişcării inerţiale a particulei.

In încheierea acestui paragraf să revenim puţin la expresia (1.10.b) a celei de a doua ipoteze a lui Louis de Broglie şi să "luăm" modulul acesteia

$$(1.28)\quad \hbar k = p \quad \leftrightarrow \quad \frac{h}{2\pi}k = p.$$

Din faptul că modulul vectorului de undă se exprimă în funcţie de lungimea de undă prin relaţia

$$(1.29)\quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

rezultă prin înlocuire în (1.28) expresia lungimii de undă de Broglie

$$(1.30)\quad \lambda = \frac{h}{p}$$

asociată oricărui corpuscul în mişcare cu impulsul p.

Această relaţie (1.30) va juca, după cum vom vedea în paragraful următor, un rol hotărâtor în interpretarea rezultatelor experimentului Davisson-Germer care va confirma, în 1927, în mod strălucit justeţea ipotezelor de Broglie, deci în mod direct, existenţa caracterului ondulatoriu al particulelor.

Tot de relaţia (1.30) este legat şi primul succes al teoriei lui de Broglie asupra undei asociate, anume justificarea relaţiei de Bohr de cuantificare. Astfel, dacă se impune, undei asociate electronului aflat în mişcare circulară în jurul nucleului, condiţia de fază a întreţinerii mişcării ondulatorii staţionare

$$(1.31)\quad kl = k2\pi r = 2\pi n \quad , \quad n\in\mathbb{N},$$

rezultă, prin utilizarea relaţiei (1.29),

(1.32) $\frac{2\pi r}{\lambda} = n$

expresie în care, înlocuind relaţia de definiţie (1.30) a lungimii de undă de Broglie, se obţine

(1.33) $2\pi pr = nh$,

adică tocmai condiţia Bohr de cuantificare a momentului orbital:

(1.34) $k_n = pr = n\hbar$.

III.2. Confirmarea experimentală a caracterului universal al ipotezelor de Broglie. Experimentul Davisson-Germer

În 1926 Elsasser arată că este posibilă evidenţierea naturii ondulatorii a substanţei prin experimente analoage celor efectuate pentru verificarea naturii ondulatorii a radiaţiei Röntgen. Astfel, fascicolul de electroni monoenergetici ar fi reflectat pe o familie de plane atomice ale unui solid cristalin obţinându-se o imagine asemănătoare celei de la difracţia radiaţiilor X. Această idee a fost verificată cu deosebit succes, doi ani mai târziu, în mod independent de către G.P. Thomson, M. Ponte şi P.S. Tartakowski care au înregistrat fotografic franje de difracţie de o remarcabilă claritate, apărute în urma trecerii electronilor prin pelicule cristaline deosebit de fine. Ulterior, tot cu electroni monoenergetici, s-au realizat şi experienţe de tip Young, obţinându-se franje de interferenţă cu totul similare celor produse de lumina monocromatică. În ce priveşte celelalte sisteme microfizice, efecte de difracţie au fost evidenţiate atât în cazul protonilor şi nucleelor de heliu, cât şi în cazul sistemelor electric neutre precum atomii şi moleculele (Stern, 1929). Mult mai târziu, odată cu punerea la punct a reactorilor nucleari, s-au obţinut şi primele difractograme neutronice care confirmau de asemenea ipotezele lui de Broglie asupra caracterului ondulatoriu al microparticulelor. Dar, pentru prima oară, ideile lui de Broglie au fost acreditate experimental, prin voia hazardului, în anul 1927...

Începând din 1920, Davisson şi Germer au analizat mecanismul de emisie al electronilor secundari în tuburile electronice. Rezultatele obţinute la studiul reflexiei fasciculului de electroni pe o suprafaţă de nichel fiind greu de interpretat din perspectiva legilor reflexiei corpusculare, ei s-au decis, în anul 1927, să se concentreze asupra reflexiei electronilor pe diferite feţe ale unui monocristal de nichel. Schema instalaţiei utilizate este prezentată în figura 2.1 şi cuprinde o sursă de electroni (SE), monocristalul de nichel (M) şi un sistem de detecţie (D). Electronii emişi de filamentul încălzit (F) sunt accelerati sub o diferenţă de potenţial U şi, după trecerea printr-un sistem de fante colimatoare (SF), părăsesc tunul electronic cu energia cinetică

$$(2.1) \qquad E_c = \frac{p^2}{2m_0} = eU.$$

După "reflexia" pe suprafaţa monocristalului, ei sunt captaţi de sistemul detector (D), reprezentat iniţial de un cilindru Faraday conectat la un electrometru. Rezultatul măsurătorilor a pus în evidenţă o reflexie selectivă a electronilor, după direcţii bine precizate, intensitatea fascicolului emergent prezentând maxime a căror poziţie unghiulară depinde de energia electronilor incidenţi.

Experimentul a fost efectuat pentru valori ale tensiunii de accelerare între 10 şi 68 de volţi şi pentru o variaţie continuă a unghiului de detecţie α, între 0° şi 90°, s-a trasat familia de caracteristici $\{I(\alpha)\}_{U\in[10,68]}$ unde I reprezintă intensitatea curentului de colector. Maximul determinat al familiei s-a obţinut pe caracteristica corespunzătoare lui $U=54V$ la unghiul $\alpha=50^o$, demonstrând astfel reflexia complet preferenţială a electronilor sub acest unghi. Neglijând refracţia undei emergente la suprafaţa cristalului, putem scrie condiţia de maxim a undelor reflectate de planele atomice ca fiind dată de relaţia lui Bragg

$$(2.2) \qquad 2d\sin\theta = m\lambda\ , \qquad m=1,2,3,...$$

în care d este distanţa interplanară, având valoarea de $0{,}91\mathring{A}$ determinată din analiza cu radiaţii X, θ este unghiul dintre fasciculul incident şi familia de plane cristaline pe care se produce "reflexia Bragg" (vezi figura 2.2), fiind

corelat cu unghiul de detecţie α prin relaţia

$$(2.3) \qquad \theta = \frac{\pi}{2} - \frac{\alpha}{2},$$

iar m este ordinul de interferenţă.

Pentru $m=1$ şi $\alpha=50^o$ se determină, din relaţia Bragg (2.2), valoarea lungimii de undă

$$(2.4) \qquad \lambda = 2 \cdot 0{,}91 \sin\left[90^o - \frac{50^o}{2}\right] = 1{,}65 \ (\mathring{A})$$

care, în cadrul explicaţiei bazată integral pe natura ondulatorie a electronului, trebuie să coincidă, în limita erorilor experimentale, cu lungimea de undă de Broglie corespunzătoare impulsului

$$(2.5) \qquad p = \sqrt{2m_0 eU} = 3{,}97 \cdot 10^{-24} \ (kg\ m\ s^{-1}).$$

Inlocuind valoarea (2.5) a impulsului în relaţia de definiţie (1.30) a lungimii de undă de Broglie, se obţine pentru aceasta valoarea

$$(2.6) \qquad \lambda = \frac{h}{p} = 1{,}67 \ (\mathring{A}),$$

în foarte bună concordanţă cu cea calculată direct din datele experimentale.

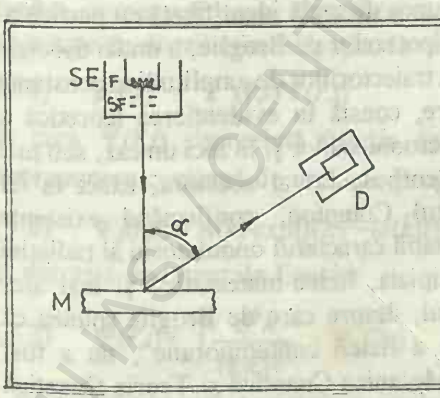


Fig. 2.1

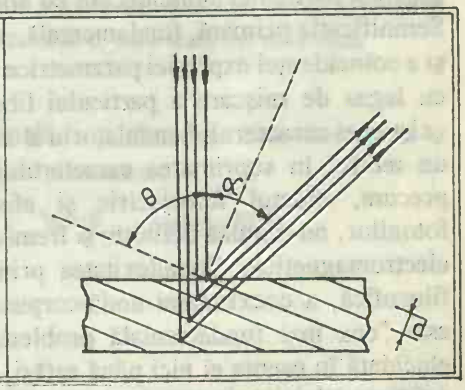


Fig. 2.2

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

III.3. Modelul de Broglie: particula ca un pachet de unde asociate

In primul paragraf am analizat cu precădere aspectele generale ale soluţiei date de Louis de Broglie problemei dualităţii undă-corpuscul şi am văzut cum, prin identificarea energiei de repaus cu cuanta Planck de energie, de Broglie obţine pulsaţia câmpului coerent al particulei şi expresia undei plane degenerate (sincrone) din care deduce apoi, prin aplicarea unei transformări Lorentz-Einstein, vestitele ipoteze (1.10) şi expresia undei plane asociate particulei relativiste în mişcare inerţială. Din analiza proprietăţilor undei de Broglie a rezultat, în a doua parte a paragrafului menţionat, următoarea concluzie importantă: deşi viteza de propagare a suprafeţelor de fază constantă este mai mare decât viteza luminii, deci acestea nu pot fi puse direct în legătură cu particula, viteza de grup şi traiectoriile de amplitudine constantă corespund excelent mişcării rectilinii şi uniforme a particulei. Cu alte cuvinte, s-ar părea că unda de Broglie (1.12), în ansamblul ei, poate fi identificată cu particula, astfel încât, dualismul undă-corpuscul ar fi nu numai rezolvat, dar şi brutal suprimat.

Caracterul complet eronat al supoziţiei de identificare a fost subliniat de însuşi de Broglie prin operarea în exclusivitate cu noţiunea de undă asociată particulei şi nicidecum cu noţiunea de undă identificată cu particula. Semnificaţia primară, fundamentală, a ipotezelor de Broglie, a undei asociate şi a coincidenţei expresiei parametrice a traiectoriilor de amplitudine constantă cu legea de mişcare a particulei libere, constă în evidenţierea teoretică a existenţei caracterului ondulatoriu al microobiectelor şi în nici un caz, sub nici un motiv, în suprimarea caracterului corpuscular al acestora, exact la fel precum, efectul fotoelectric şi efectul Compton, confirmând existenţa fotonilor, nu elimină definitiv şi iremediabil caracterul ondulatoriu al radiaţiei electromagnetice. Complexitatea principială, fizico-matematică şi mai ales filozofică, a coexistenţei undă-corpuscul, despre care de Broglie spunea că este "cea mai fundamentală problemă a fizicii contemporane", nu a fost elucidată în esenţa ei nici până astăzi. Mecanica Cuantică şi Teoria Cuantică a Câmpurilor, două teorii admirabile, ne arată cum să luăm în considerare natura duală a microobiectelor, cum să formulăm şi să integrăm ecuaţiile ce modelează procesele din microcosmos şi în special ce şi cum să măsurăm, cu

aparatele noastre macroscopice, pentru a înţelege rezultatele pe care acestea ni le indică şi pentru a prevedea altele, dar la întrebarea asupra naturii ultime a materiei răspund că nu are sens. Cu cât vom dori să ne "apropiem" mai mult de microparticulă, cu atât vom avea nevoie de mai multă energie şi cu cât vom avea mai multă energie cu atât vom declanşa mai multe procese noi care vor perturba şi chiar vor transforma complet microparticula. Din acest punct de vedere (singurul confirmat pînă în prezent) nu există nici o posibilitate de interacţiune "absolut pasivă" cu microobiectul, adică nu avem nici o şansă să îl putem contempla în natura sa ultimă fără a-l perturba, iar perturbându-l îşi va "ascunde" esenţa naturii sale.

Pentru cititorul aflat la început de drum în ale Mecanicii Cuantice şi poate, mai apoi, în ale Teoriei Cuantice a Câmpurilor, ceea ce dorim să înţeleagă din aceste rânduri este faptul că puterea ştiinţifică a celor două teorii este foarte mare şi pe deplin confirmată experimental, dar ele ne spun că microobiectul este numai potenţial şi undă şi corpuscul; în mod real, prin răspunsul lui în detectoarele noastre, el ne va arăta numai una din naturile sale, corpusculară sau ondulatorie, ondulatorie sau corpusculară, dar niciodată simultan pe amândouă.

Prima tentativă de explicare a legăturii ce există între cele două caractere ale microobiectului a fost efectuată de Erwin Schrödinger în 1926 şi este denumită uneori "modelul de Broglie al particulei". In cadrul acestui model, corpusculul este identificat cu un pachet de unde de Broglie a cărui densitate de distribuţie în spaţiu, la momentul t, este dată de mărimea

$$(3.1) \qquad \rho(\vec{r},t) = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$

în care $\Psi(\vec{r},t)$ reprezintă funcţia de undă a pachetului, considerată ca o suprapunere continuă de unde de Broglie "elementare"

$$(3.2) \qquad \Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = A(\vec{k})\exp[i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k})t)] \; ; \quad \hbar\vec{k}=\vec{p} \; , \quad \hbar\omega(\vec{k})=E(\vec{p})$$

şi descrisă de integrala Fourier

$$(3.3) \qquad \Psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \Psi_{\vec{k}}(\vec{r},t) .$$

Cea dintâi premisă teoretică a modelului, pe care este de altfel bazată şi întreaga Mecanică Cuantică, este caracterul liniar al ecuaţiei undelor asociate microparticulelor, astfel încât, în virtutea principiului superpoziţiei (liniare),

dacă fiecare undă de Broglie elementară (3.2) este o soluţie a acestei ecuaţii atunci şi integrala Fourier (3.3), reprezentând funcţia de undă a pachetului, va fi de asemenea o soluţie a ecuaţiei considerate.

A doua premisă a modelului ia în considerare natura reală a oricărui proces ondulatoriu. In toate aceste procese este imposibilă obţinerea unor unde plane strict monocromatice, deoarece, o astfel de undă ar trebui să fie generată în infinitul temporal trecut şi să existe veşnic în infinitul viitor, fără a suferi, în propagarea ei în absolut tot spaţiul infinit, nicăieri şi nicicând, nici cea mai mică interacţiune cu un alt sistem fizic. Proprietăţile esenţiale ale unei asemenea unde, planietatea şi monocromaticitatea, vor fi principial spulberate de însăşi prezenţa fizică, într-un volum oricât de mic şi pentru o durată oricât de efemeră a observatorului ce ar încerca să le detecteze. O undă reală va fi reprezentată întotdeauna printr-un grup de unde plane strict monocromatice şi această amprentă o va purta şi microparticula căreia îi este asociată. Din acest motiv, este posibilă cel mult identificarea particulei cu un pachet de unde asociate iar, dacă viteza de grup a pachetului şi legea de mişcare a "centrului său de masă" vor coincide cu proprietăţile mişcării inerţiale a corpusculului, atunci s-ar putea ca identificarea să reuşească.

A treia premiză, şi ultima, este legată de existenţa de principiu a caracterului normabil al funcţiei de undă a pachetului, adică de faptul că dacă densitatea (3.1) reprezintă într-adevăr, la orice moment, densitatea de distribuţie în spaţiu a microobiectului, atunci integrale ei pe tot spaţiul trebuie să fie mărginită. Utilizând relaţiile (3.2), (3.3) şi (3.1) se obţine

$$\int \rho(\vec{r},t)\,d^3x = \tag{3.4}$$
$$= \int d^3x \frac{d^3k' d^3k}{(2\pi)^3} A^*(\vec{k}')A(\vec{k}) \exp[i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}] \exp[i[\omega(\vec{k}')-\omega(\vec{k})]t]$$

de unde rezultă integrala

$$\int \rho(\vec{r},t)\,d^3x = \tag{3.5}$$
$$= \int d^3k' d^3k\; A^*(\vec{k}')A(\vec{k})\delta(\vec{k}'-\vec{k})\; e^{i[\omega(\vec{k}')-\omega(\vec{k})]t} \equiv \int d^3k\,|A(\vec{k})|^2$$

care, în principiu, poate fi finită, în timp ce, dacă încercăm acelaşi lucru cu unda de Broglie (1.12)

(3.6) $\Psi(\vec{r},t) = A\ \exp\{i[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k})t]\}$, $A=const.\in \mathbb{C}$,

obţinem evident

(3.7) $\rho(\vec{r},t) = |A|^2 = const.$

de unde rezultă

(3.8) $\int \rho(\vec{r},t)d^3x = |A|^2\int d^3x = \infty$,

adică imposibilitatea modelării <u>directe</u> a particulei printr-o "singură" undă asociată.

In continuare vom prezenta cel mai important rezultat, cu un înalt grad de generalitate, la care conduce modelul de Broglie, prin identificarea particulei cu pachetul de unde asociate. Pentru a urmări mai uşor calculele vom reduce la 1 numărul de dimensiuni atât ale spaţiului euclidian, în care se găseşte particula, cât şi ale spaţiului impulsurilor K. In acest caz, unda de Broglie elementară are expresia

(3.9) $\Psi_k(x,t) = A(k)\ \exp\{i[kx - \omega(k)t]\}$,

iar funcţia de undă a pachetului este dată de integrala

(3.10) $\Psi(x,t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\ A(k)\ \exp\{i[kx - \omega(k)t]\}$.

Evident, densitatea de distribuţie spaţială va fi dată de formula

(3.11) $\rho(x,t)= \int \frac{dk'dk}{2\pi}\ A^*(k')A(k)\exp[i(k-k')x]\exp\{i[\omega(k')-\omega(k)]t\}$

a cărei integrală pe tot spaţiul $\mathbb{R}$ de configuraţie o notăm cu

(3.12) $N \equiv \int \rho(x,t)dx = \int dk\ |A(k)|^2 < \infty$,

presupunând în acest fel că funcţiile de amplitudine $A(k)$: $K\equiv\mathbb{R} \to \mathbb{C}$ sunt pătratic integrabile, adică aparţin spaţiului $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R})$.

Prin analogie cu Mecanica Mediilor Continue, definim poziţia "centrului de masă" al pachetului de unde, la momentul t, prin expresia

$$(3.13)\quad \bar{x}(t) = \frac{1}{N}\int x\ \rho(x,t)dx$$

care, după cum se observă, având în vedere relaţia (3.12), are exact forma unei relaţii de calcul a valorii medii a coordonatei x.

Inlocuind în (3.13) forma explicită a densităţii de distribuţie spaţială, avem

$$(3.14)\quad \bar{x}(t) = \frac{1}{N}\int \frac{dk'dk}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{i(k-k')x}\ x\right] A^*(k')A(k)\exp\{i[\omega(k')-\omega(k)]t\}$$

unde integrala după "x" din membrul drept o "recunoaştem" imediat din proprietatea de derivare a transformatei Fourier

$$(3.15)\quad \frac{d}{d\chi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\ f(x)e^{i\chi x}\right] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(ix)f(x)e^{i\chi x}.$$

Astfel, pentru $f(x)\equiv 1$, integrala din membrul stâng al relaţiei (3.15) este chiar funcţionala δ Dirac multiplicată cu factorul (2π), adică

$$(3.16)\quad \delta(\chi) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp(i\chi x),$$

astfel încât, prin înlocuire în (3.15) avem

$$(3.17)\quad \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{i\chi x}\ x = -\ i\ 2\pi\delta'(\chi).$$

Efectuând în (3.14) schimbarea de variabilă

$$k'=k-\chi\ \ ;\ \ dk'=-d\chi$$

şi introducând apoi rezultatul (3.17), obţinem pentru $\bar{x}(t)$ expresia

$$(3.18)\quad \bar{x}(t) = -\frac{i}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dkA(k)e^{-i\omega(k)t}\cdot\left\{\int_{-\infty}^{\infty} d\chi\ \delta'(\chi)A^*(k-\chi)\exp[i\omega(k-\chi)t]\right\}$$

în care utilizăm, pentru ultima integrală din membrul drept, proprietatea de

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

definiţie a derivatei funcţionale $\delta(\chi)$, adică

$$(3.19)\quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(\chi) f(\chi) d\chi = -\left[\frac{df}{d\chi}\right]_{\chi=0},$$

astfel încât, pentru cazul particular al aplicaţiei

$$(3.20)\quad f(\chi) = A^*(k-\chi)\,\exp[it\omega(k-\chi)],$$

relaţia (3.19) se scrie

$$(3.21)\quad \int_{-\infty}^{\infty} d\chi\ \delta'(\chi) A^*(k-\chi)\exp[i\omega(k-\chi)t] = \left[\frac{dA^*}{dk} + itA^*(k)\cdot\frac{d\omega}{dk}\right]\cdot e^{i\omega(k)t}.$$

Utilizând (3.21), ecuaţia (3.18) devine

$$(3.22)\quad \bar{x}(t) = -\frac{i}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dk \left(\frac{dA^*}{dk}\right)A(k) + \left\{\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ |A(k)|^2 \cdot \frac{d\omega}{dk}\right\}\cdot t.$$

Interpretarea primului termen din membrul drept al acestei ecuaţii este evidentă, deoarece pentru $t=0$ avem

$$(3.23)\quad \bar{x}(0) = -\frac{i}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \frac{dA^*}{dk}A(k),$$

adică el reprezintă poziţia iniţială a "centrului de masă" al pachetului. Cel mai "interesant" este desigur al doilea termen, pe care, făcând apel la ipotezele de Broglie (1.10) şi la relaţia lui Einstein (1.24), putem să-l scriem

$$(3.24)\quad \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dk|A(k)|^2\cdot\frac{d\omega}{dk} = \left[\int_{-\infty}^{\infty}|A(p)|^2dp\right]^{-1}\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\frac{cp}{\sqrt{p^2+m_0^2c^2}}\,|A(p)|^2\cdot dp,$$

adică

$$(3.25)\quad N^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ |A(k)|^2\ \frac{d\omega}{dk} = \prec \frac{cp}{\sqrt{p^2+m_0^2c^2}} \succ = \bar{v}$$

unde $\prec\cdot\succ$ reprezintă valoarea medie în sensul densităţii de distribuţie

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\rho(p) = |A(p)|^2$$

din spaţiul K al impulsului, iar $\bar{v}$ este valoarea medie a vitezei "centrului de masă" al pachetului, adică a vitezei de grup

$$\bar{v} = <\frac{d\omega}{dk}>.$$

Prin înlocuirea relaţiilor (3.24) şi (3.25) în ecuaţia (3.22) obţinem legea de mişcare a "centrului de inerţie" al grupului de unde de Broglie

$$\bar{x}(t) = \bar{x}(0) + <\frac{c\,p}{\sqrt{p^2+m_0^2c^2}}>t \tag{3.26}$$

$$\bar{x}(t) = \bar{x}(0) + \bar{v}\cdot t,$$

care este în excelent acord cu legea mişcării inerţiale a particulei relativiste clasice

$$x(t) = x_0 + \frac{c\,p}{\sqrt{p^2+m_0^2c^2}}\cdot t \tag{3.27}$$

$$x(t) = x_0 + vt \qquad ; v = \frac{c\,p}{\sqrt{p^2+m_0c^2}}$$

Rezultatele obţinute pot fi generalizate fără dificultăţi principiale la cazul tratării 3-dimensionale a problemei, situaţie în care, valoarea medie la momentul t a razei vectoare $\vec{r}$, adică $\bar{\vec{r}}(t)$, semnificând vectorul de poziţie al centrului de masă al pachetului, va fi definită prin relaţia

$$\bar{\vec{r}} = \left[\int \rho(\vec{r},t)\, d^3x\right]^{-1}\cdot \int \vec{r}\rho(\vec{r},t)\, d^3x, \tag{3.28}$$

în care densitatea distribuţiei spaţiale a grupului de unde asociate are, în acord cu formulele (3.1)-(3.3), expresia

$$\rho(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k'd^3k}{(2\pi)^3} A^*(\vec{k}')A(\vec{k})\exp\{i[(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}-(\omega(\vec{k})-\omega(\vec{k}'))\cdot t\}. \tag{3.29}$$

Pentru legea de mişcare a centrului de masă al pachetului de unde

asociate microobiectului liber se obţine forma vectorială

$$\bar{\vec{r}} = \bar{\vec{r}}(0) + <\frac{c\,p}{\sqrt{|\vec{p}|^2+m_0^2c^2}}>t \qquad ; \ \bar{\vec{v}} = <\frac{c\,\vec{p}}{\sqrt{|\vec{p}|^2+m_0^2c^2}}>$$

(3.30)

$$\bar{\vec{r}}(t) = \bar{\vec{r}}(0) + \bar{\vec{v}}t,$$

care "revine în termeni de coordonate" $\{\bar{x}^1=\bar{x}, \bar{x}^2=\bar{y}, \bar{x}^3=\bar{z}\}$ şi $\{p^1=p_x, p^2=p_y, p^3=p_z\}$ la expresiile scalare (3.26).

Când am început calculele care ne-au condus la legea de mişcare (3.26), respectiv (3.30), am afirmat că vom obţine un rezultat cu un înalt grad de generalitate, la care conduce modelul de Broglie prin identificarea particulei cu "pachetul de unde asociate". Deoarece, în paragraful următor, vom demonstra insuficienţa unei asemenea identificări, este absolut necesar să lămurim caracterul contradictoriu al acestor două afirmaţii.

Pentru aceasta, să observăm "din capul locului" că dacă în relaţia (3.2) nu impunem ipotezele de Broglie (1.10), atunci $\Psi_k(\vec{r},t)$ reprezintă pur şi simplu o undă elementară de orice natură, restricţionată doar de condiţia de a fi scalară. In acest fel, relaţiile (3.3) şi (3.1) vor reprezenta, respectiv, funcţia de undă şi densitatea de distribuţie în spaţiu a oricărui pachet de unde scalare, iar ecuaţia (3.22), pe care o putem scrie sub forma

$$\bar{x}(t) = \bar{x}(0) + <\frac{d\omega}{dk}>\cdot t, \tag{3.31}$$

sau, în cazul 3-dimensional

$$\bar{\vec{r}}(t) = \bar{\vec{r}}(0) + <\nabla_{\vec{k}}\,\omega(k)>\cdot t, \tag{3.32}$$

va avea, la modul cel mai general, semnificaţia legii de mişcare a centrului de pondere al pachetului. Cu alte cuvinte, această lege de mişcare este general valabilă pentru orice grup de unde aflat în propagare liberă în spaţiu, oricare ar fi forma funcţiei de amplitudine pătratic integrabile $A(\vec{k})$ a undelor elementare ce compun pachetul.

Prin impunerea ipotezelor de Broglie se obţin într-adevăr legile de mişcare (3.26), (3.30), dar asta nu înseamnă, cu necesitate, identificarea particulei cu pachetul de unde asociate. Ceea ce demonstrează de fapt cele

două ecuaţii, este că, în cazul microparticulei libere, prin luarea în considerare a proprietăţilor ondulatorii ale acesteia, mişcarea medie a ei se face în acord cu legile mecanicii clasice, în speţă cu legea mişcării inerţiale. Gradul înalt de generalitate al acestui rezultat este indus direct de caracterul general al ipotezelor de Broglie şi al ecuaţiilor (3.31), (3.32), fiind astfel independent de presupunerea făcută de Schrödinger, că particula ar fi, în sensul cel mai strict al cuvântului, un grup de unde de Broglie. Acesta şi este motivul pentru care, în rândurile premergătoare formulei (3.30), am scris "legea de mişcare a centrului de masă al pachetului de unde asociate microobiectului liber" şi nu, de exemplu, "legea de mişcare a particulei identificate cu pachetul de unde de Broglie".

Înainte de a trece la paragraful următor, să vedem totuşi de ce, prin prisma rezultatelor (3.26) (sau(3.30)), modelul de Broglie pare la prima vedere complet satisfăcător. In acest sens, să ne limităm la cazul tratării unidimensionale şi să presupunem că funcţia de amplitudine $A(k)$ a undei elementare (3.9) are următoarea expresie

$$(3.33)\qquad A(k) = \begin{cases} 0 \;;\; -\infty < k < k_0 - \dfrac{\Delta k}{2} \\ A \;;\; k_0 - \dfrac{\Delta k}{2} \le k \le k_0 + \dfrac{\Delta k}{2} \\ 0 \;;\; k_0 + \dfrac{\Delta k}{2} < k < \infty \end{cases}$$

în care "extensia" Δk a vectorului de undă este presupusă mult mai mică decât valoarea "centrală" $|k_0|$ a acestuia. Din (3.33) rezultă imediat

$$(3.34)\qquad \frac{dA^*}{dk} = A^* \left[\delta\left(k - \left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right)\right) - \delta\left(k - \left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)\right)\right]$$

care, prin înlocuirea în expresia (3.24), ne dă pentru $\bar{x}(0)$ valoarea

$$(3.35)\qquad \bar{x}(0) = -\frac{i}{A\,\Delta k}\left[A\left(k_0 - \frac{\Delta k}{2}\right) - A\left(k_0 + \frac{\Delta k}{2}\right)\right] \equiv 0,$$

astfel încât ecuaţia de mişcare (3.22) capătă forma particulară

$$(3.36)\quad \bar{x}(t) = \frac{t}{\Delta k}\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} dk\cdot\frac{d\omega}{dk} = \frac{t}{\Delta k}\left[\omega\left(k_0+\frac{\Delta k}{2}\right)-\omega\left(k_0-\frac{\Delta k}{2}\right)\right],$$

care, datorită ipotezei $\Delta k < |k_0|$, se reduce la expresia

$$(3.37)\quad \bar{x}(t) = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}\cdot t.$$

Utilizând în ecuaţia (3.37) ipotezele de Broglie şi ecuaţia lui Einstein (1.24), obţinem legea de mişcare inerţială

$$(3.38)\quad \bar{x}(t) = \frac{c\,p_0}{\sqrt{p_0^2+m_0^2c^2}}\,t = v_0 t$$

a pachetului de unde de Broglie caracterizat In spaţiul impulsului de densitatea

$$(3.39)\quad \rho(p) = \begin{cases} 0 & ;\ -\infty<p<p_0-\dfrac{\Delta p}{2} \\ |A|^2 & ;\ p_0-\dfrac{\Delta p}{2}\le p\le p_0+\dfrac{\Delta p}{2} \\ 0 & ;\ p_0+\dfrac{\Delta p}{2}<p<\infty. \end{cases} \quad ;\quad \Delta p<|p_0|$$

Efectuând o comparaţie cu ecuaţiile (3.26) şi (3.27), observăm că, în cazul distribuţiei după impuls (3.39), deşi ecuaţia (3.38) este în mod cert un caz particular al ecuaţiei (3.26), forma ei corespunde exact, pentru $x_0=0$, ecuaţiei (3.27), care exprimă legea de mişcare inerţială a particulei relativiste clasice.

Astfel, la prima vedere, interpretarea dată de Schrödinger pare absolut corectă:

O particulă de masă m_0 şi impuls $\vec{p}_0$ este un pachet "îngust", $|\Delta\vec{p}|<|\vec{p}_0|$, de unde de Broglie elementare

$$(3.40)\quad \Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = A(\vec{p})\exp\left\{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}\cdot\vec{r}-E(\vec{p})t]\right\}\ ;\ E(\vec{p}) = c\left[|\vec{p}|^2+m_0^2c^2\right]^{1/2}$$

BCU CAROL I CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu funcţia de amplitudine

$$A(\vec{p}) = \begin{cases} A \ ; \ |\vec{p}-\vec{p}_0| \le \left|\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right| \\ 0 \ ; \ |\vec{p}-\vec{p}_0| \ge \left|\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right| \end{cases} \tag{3.41}$$

şi densitatea distribuţiei spaţiale

$$\rho(\vec{r},t;\vec{p}_0,\Delta\vec{p}) =$$

$$= |A|^2 \int\limits_{K\left(\vec{p}_0+\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right)\times K\left(\vec{p}_0+\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right)} \frac{d^3p'd^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\left(\vec{r}-\frac{c^2\vec{p}_0}{E(\vec{p}_0)}\cdot t\right)\right\}. \tag{3.42}$$

a cărui mişcare inerţială se va supune exact legii "clasice"

$$\vec{r} = \vec{r}(0) + \frac{c^2\vec{p}_0}{E(\vec{p}_0)}\cdot t. \tag{3.43}$$

III.4. Inconsistenţa principială a identificării particulei cu grupul de unde de Broglie. Delocalizarea impuls-coordonată şi destrămarea pachetului

După cum se cunoaşte din teoria generală a complexităţii, orice model îşi are propriile limite de valabilitate, iar descoperirea acestora se face prin analiza complexă a tuturor consecinţelor modelului.

In baza acestei reguli, faţă de care modelul de Broglie nu reprezintă o excepţie, să investigăm pentru început concluziile la care conduc formulele (3.40)-(3.43) asupra valabilităţii însăşi a interpretării date de Schrödinger "structurii primare" a particulei.

Mai întâi, vom determina forma funcţiei de undă a pachetului de Broglie alcătuit de undele elementare (3.40), de amplitudine (3.41), şi vom

demonstra expresia (3.42) a densităţii de distribuţie în spaţiu a particulei libere de masă m_0 şi impuls $\vec{p}_0$. Datorită ipotezei de "selectivitate", $|\Delta\vec{p}|<|\vec{p}_0|$, energia $E(\vec{p})$ se poate scrie

$$(4.1)\qquad E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0) + \left[\nabla_{\vec{p}} E\right]_{\vec{p}=\vec{p}_0} \cdot (\vec{p}-\vec{p}_0)\ ,\quad |\vec{p}-\vec{p}_0| \le \left|\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right| < |\vec{p}_0|$$

de unde rezultă, prin înlocuire în (3.40), expresia undei de Broglie elementare

$$(4.2)\qquad \Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = A\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot\vec{r} - E(\vec{p}_0)\cdot t - t\left[\nabla_{\vec{p}} E\right]_{\vec{p}=\vec{p}_0}\cdot(\vec{p}-\vec{p}_0)\right]\right\}\ ,\quad |\vec{p}-\vec{p}_0| \le \left|\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right|$$

pe care o aducem după un calcul scurt, la forma

$$(4.3)\qquad \Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}_0)\cdot(\vec{r}-\vec{v}_0 t)\right]\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}_0\cdot\vec{r} - E(\vec{p}_0)t\right]\right\},$$

în care

$$(4.4)\qquad \vec{v}_0 = \frac{c^2\vec{p}_0}{E(\vec{p}_0)} = \left[\nabla_{\vec{p}} E\right]_{\vec{p}=\vec{p}_0}$$

reprezintă viteza particulei.

Din relaţia de definiţie (3.3) rezultă, prin înlocuirea expresiei (4.3), forma concretă a funcţiei de undă a pachetului de Broglie în interpretarea dată de Schrödinger

$$(4.5)\ \Psi(\vec{r},t) = A\left\{\int\limits_{|\vec{p}-\vec{p}_0|\le\frac{\Delta\vec{p}}{2}} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}_0)\cdot(\vec{r}-\vec{v}_0 t)\right]\right\}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}_0\cdot\vec{r} - E(\vec{p}_0)t\right],$$

iar prin utilizarea acesteia în relaţia de definiţie (3.1) obţinem direct formula (3.42) a densităţii distribuţiei spaţiale, pe care o vom scrie sub forma

$$(4.6)\qquad \rho(\vec{r},t;\Delta\vec{p}) = \frac{|A|^2}{(2\pi\hbar)^3}\left|\int\limits_{|\vec{p}-\vec{p}_0|\le\left|\frac{\Delta\vec{p}}{2}\right|} d^3q\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{r}-\vec{v}_0 t)\cdot\vec{q}\right]\right|^2;\quad \vec{q}=\vec{p}-\vec{p}_0.$$

Pentru o mai bună evidenţiere a felului în care modelul de Broglie conţine printre rezultatele sale "semnele" invalidării principiu a identificării particulei cu pachetul de unde asociate, să evaluăm integrala din expresia (4.6)

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în sistemul de coordonate rectangulare $\left\{-\infty<x^{\mu}<\infty \;;\; -\frac{\Delta p_{\mu}}{2}\le q_{\mu}\le\frac{\Delta p_{\mu}}{2}\right\}_{\mu=\overline{1,3}}$.

Astfel, avem

$$(4.7)\quad F(\vec{r},t;\Delta\vec{p}) = \int\limits_{|\vec{q}|\le\frac{\Delta\vec{p}}{2}} d^3q\,\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{r}-\vec{v}_0t)\cdot\vec{q}\right] = \prod_{\mu=1}^{3} F_{\mu}\left(x^{\mu},t;\Delta p_{\mu}\right),$$

unde

$$(4.8)\quad F_{\mu}\left(x^{\mu},t;\Delta p_{\mu}\right) = \int\limits_{-\frac{\Delta p_{\mu}}{2}}^{\frac{\Delta p_{\mu}}{2}} dq_{\mu}\cdot\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)q_{\mu}\right] \text{ fără sumare după } \mu,$$

adică

$$(4.9)\quad F_{\mu}\left(x^{\mu},t;\Delta p_{\mu}\right) = \left(\Delta p_{\mu}\right)\frac{\sin\left[\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\cdot\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}\right]}{\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\cdot\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}},$$

ceea ce conduce, prin înlocuire în relaţia (4.7), la expresia funcţiei de amplitudine în spaţiul de configuraţie

$$(4.10)\quad F(\vec{r},t;\Delta\vec{p}) = \Delta^3p\prod_{\mu=1}^{3}\frac{\sin\left[\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}\right]}{\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}},$$

cu ajutorul căreia densitatea distribuţiei spaţiale a grupului de unde de Broglie (adică a particulei în interpretarea dată de Schrödinger) capătă forma concretă

$$(4.11)\quad \rho(\vec{r},t;\Delta\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3}\cdot\left[|A|\Delta^3p\right]^2\cdot\prod_{\mu=1}^{3}\left[\frac{\sin\left[\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}\right]}{\left(x^{\mu}-v_0^{\mu}t\right)\frac{\Delta p_{\mu}}{2\hbar}}\right]^2.$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Fixarea valorii lui $|A|$ se face prin condiţia de normare

$$(4.12)\quad \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{r},t;\Delta\vec{p})d^3x = 1$$

adică

$$(4.13)\quad \left(\frac{1}{\pi}\right)^3 \cdot |A|^2 \cdot \Delta^3 p \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\xi}{\xi^2} d\xi \right\}^3 = 1 .$$

Integrala din (4.13) se calculează imediat deoarece

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\xi}{\xi^2} d\xi = -\left[\frac{\sin^2\xi}{\xi}\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(2\xi)}{\xi} d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin\eta}{\eta} d\eta = \pi,$$

de unde rezultă, prin înlocuire în relaţia (4.13),

$$(4.14)\quad |A| = \frac{1}{\sqrt{\Delta^3 p}} .$$

Din (4.11) şi (4.14) obţinem expresia densităţii normate a pachetului de Broglie

$$(4.15)\quad \rho(\vec{r},t;\Delta\vec{p}) = \frac{\Delta^3 p}{[2\pi\hbar]^3} \prod_{\mu=1}^{3} \left[\frac{\sin\left[\left(x^\mu - v_0^\mu t\right)\frac{\Delta p_\mu}{2\hbar}\right]}{\left(x^\mu - v_0^\mu t\right)\cdot\frac{\Delta p_\mu}{2\hbar}} \right]^2 ,$$

care conţine toate informaţiile necesare testării complete a modelului.

Aşa cum era de aşteptat, în acord cu cele discutate la sfârşitul paragrafului anterior, densitatea normată (4.15) posedă un maxim dominant

$$(4.16)\quad \rho_0 = \frac{\Delta^3 p}{[2\pi\hbar]^3}$$

corespunzător centrului pachetului, care se deplasează rectiliniu şi uniform cu viteza $\vec{v}_0$ a particulei

$$(4.17)\quad x^\mu_{(0)} = v_0^\mu t .$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Un aspect mai puţin evidenţiat în expresia (3.42) este prezenţa maximelor secundare

$$(4.18)\quad \rho_{\vec{n}} \cong \frac{\Delta^3 p}{[2\pi\hbar]^3} \prod_{\mu=1}^{3} \left[\frac{\frac{1}{\pi}}{n_\mu + \frac{1}{2}} \right]^2 ,$$

care se deplasează sincron cu maximul dominant, pe traiectoriile

$$(4.19)\quad x^\mu_{(\vec{n})} \cong \frac{2\pi\hbar}{\Delta p_\mu} \left(n_\mu + \frac{1}{2} \right) + v_0^\mu t ,$$

ceea ce atestă, în limita de valabilitate a condiţiei de "selectivitate" $|\Delta\vec{p}| < |\vec{p}_0|$, stabilitatea globală a pachetului de Broglie. Mai mult decât atât, având în vedere că amplitudinile (4.18) ale maximelor secundare nu depăşesc 6% din valoarea maximului principal (4.16), acestea ar putea fi neglijate într-o primă aproximaţie, astfel încât am obţine o imagine deosebit de tentantă a coexistenţei fizice a particulei cu pachetul de unde asociate, prin identificarea acesteia la orice moment t, cu domeniul

$$(4.20)\quad S = \left\{ (x^\mu) \,\middle|\, |x^\mu - v_0^\mu t| \le \frac{2\pi\hbar}{\Delta p_\mu} \;;\; \mu = \overline{1,3} \right\}$$

corespunzător "zonei de acţiune" a maximului principal.

Din "nefericire", această imagine este pe atât de incorectă pe cât de simplă pare, iar cauza rezidă în inconsistenţa aproximaţiei de neglijare a ponderii maximelor secundare. Intr-adevăr, din estimarea ponderii pachetului de Broglie

$$(4.21)\quad \wp[S] = \frac{\Delta^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \prod_{\mu=1}^{3} \left\{ \int\limits_{|x^\mu - v_0^\mu t| \le \frac{2\pi\hbar}{\Delta p_\mu}} dx^\mu \cdot \left[\frac{\sin\left[(x^\mu - v_0^\mu t) \frac{\Delta p_\mu}{2\hbar} \right]}{(x^\mu - v_0^\mu t) \frac{\Delta p_\mu}{2\hbar}} \right]^2 \right\}$$

în "zona de acţiune" a maximului central, rezultă

$$(4.22)\quad \wp[S] = \frac{1}{\pi^3}\left\{\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\sin^2\xi}{\xi^2}d\xi\right\}^3 \cong 0{,}78,$$

ceea ce înseamnă de fapt o pondere de 22% a restului pachetului în domeniul $\mathbb{R}^3-S$, adică mai mult de 25% din "efectul" particulei în zona ei de localizare S, căci

$$(4.23)\quad \frac{\wp[\mathbb{R}^3-S]}{\wp[S]} = \frac{1-\wp[S]}{\wp[S]} \cong 28\%.$$

Inspectând formulele (4.21)-(4.23) am putea spune că obiecţia ridicată este neesenţială, deoarece nu avem decât să calculăm integrala din (4.22) între -2π şi 2π, adică

$$\wp[S'] = \frac{1}{\pi^3}\left\{\int_{-2\pi}^{2\pi}\frac{\sin^2\xi}{\xi^2}d\xi\right\}^3 \cong 0{,}94$$

pentru a reduce la numai

$$\frac{\wp[\mathbb{R}^3-S']}{\wp[S']} = 6{,}4\%$$

raportul dintre ponderea "exterioară" a pachetului şi cea "interioară". Da...dar procedând în acest fel mărim de opt ori volumul zonei

$$S' = \left\{(x^\mu)\;\middle|\;|x^\mu - v_0^\mu t| \le \frac{4\pi\hbar}{\Delta p_\mu}\;;\;\mu=\overline{1,3}\right\}$$

faţă de cel al zonei "iniţiale" S (4.20). Continuând să includem în "zona de acţiune" maxime secundare de ordin tot mai înalt, vom aduce ponderea (4.21) la valoarea 1, dar vom extinde şi domeniul S la întreg spaţiul fizic $\mathbb{R}^3$, adică, prin identificarea ad litteram a particulei cu grupul de unde de Broglie, am ajuns la concluzia omniprezenţei absolut reale a acesteia.

Dacă ipoteza de identificare, formulată de Schrödinger, nu merge, să păstrăm atunci cadrul general al modelului de Broglie, adică relaţiile oferite de acesta, dar să introducem o altă ipoteză şi anume:

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

particula, având un caracter punctual (de extensiune dimensională nulă), nu poate fi identificată cu grupul de unde de Broglie, dar ea se află în directă legătură cu acesta, fiind "grupată" în el, într-o vecinătate a maximului principal pentru care ponderea pachetului de unde asociate este mai mare sau egală cu 50%.

După cum se observă, această ipoteză, formulată pentru prima dată de Louis de Broglie în 1927 în lucrările sale referitoare la "teoria undei pilot"şi "teoria dublei soluţii" [16, 18] (asupra cărora, din păcate, nu putem insista acum), are faţă de ipoteza de identificare trei avantaje destul de serioase:

(i) elimină problema unei prezenţe reale a particulei deoarece, în baza caracterului punctual, aceasta nu mai este identificată cu pachetul de unde asociate,

(ii) ponderea de 78% asociată "zonei de acţiune" este suficientă pentru a considera domeniul S(4.20), ca vecinătatea maximului principal în care este "grefată" particula,

(iii) permite restrângerea domeniului S la domeniul

$$\text{(4.24)} \qquad B = \left\{ (x^\mu) \,\middle|\, |x^\mu - v_0^\mu t| \le \frac{\pi\hbar}{\Delta p_\mu} \;;\; \mu = \overline{1,3} \right\}$$

în care pachetul de Broglie are o pondere de aproximativ

$$\text{(4.25)} \qquad \wp[B] = \frac{1}{\pi^3} \left\{ \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2\xi}{\xi^2} d\xi \right\}^3 \cong 51\%.$$

In ciuda acestor avantaje, tentativa de a privi particula ca un punct material, scufundat în pachetul de Broglie undeva în vecinătatea B a maximului principal, şi ghidat de acesta, împreună cu tot restul pachetului, pe

o traiectorie rectilinie parcursă uniform, este şi ea sortită eşecului.

Prima cauză a acestui nou insucces constă în imposibilitatea localizării oricât de precise a particulei în sânul unui pachet de lărgime spectrală $\left|\frac{\Delta\vec{p}}{\hbar}\right|$ finită. Intr-adevăr, din relaţia de definiţie (4.24) rezultă că, la orice moment t, paralelipipedul care reprezintă domeniul B are laturile de lungime

$$(4.26)\quad \Delta x^{\mu} = \frac{2\pi\hbar}{\Delta p_{\mu}} = \frac{h}{\Delta p_{\mu}} \quad ; \quad \mu=\overline{1,3}$$

şi volumul

$$(4.27)\quad \Delta^3 x = \frac{h^3}{\Delta^3 p}.$$

Aceste două ecuaţii, care sunt o formă particulară a relaţiilor de imprecizie formulate de Werner Heisenberg:

$$(4.28)\quad \Delta x^{a}\,\Delta p_{a} \geq \frac{\hbar}{2} \quad ; \quad a=\overline{1,f} \text{ cu } f \text{ - numărul gradelor de libertate}$$

$$\Delta^f x\,\Delta^f p \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^f$$

(pe care le vom analiza în capitolul V), demonstrează complementaritatea naturii corpuscular-ondulatorie a microparticulei. Orice încercare de localizare exactă, $\Delta x^{\mu}=0$, a particulei conduce inevitabil la creşterea nelimitată a lărgimii spectrale a pachetului $\Delta p_{\mu}=\infty$, deci la imposibilitatea determinării simultane a impulsului $\vec{p}$ al particulei. Dacă, din contra, se încearcă reducerea la zero a lărgimii spectrale a pachetului în vederea definirii exacte a impulsului $\vec{p}_0$ al particulei, atunci se va obţine o creştere nelimitată, $\Delta x^{\mu}=\infty$, a impreciziei în determinarea poziţiei particulei, deci o completă delocalizare a acesteia.

A doua cauză, la fel de generală ca şi prima, dar mai importantă decât aceasta în contextul analizei pe care o facem posibilităţii stabilirii unei legături directe între funcţia de undă a pachetului şi structura însăşi a particulei, este

reprezentată de proprietatea de "destrămare" a pachetelor de unde.

Pentru a demonstra caracterul general al "procesului de destrămare" este suficient să îl analizăm în cazul unidimensional, prin stabilirea legii de evoluţie

$$(4.29)\quad [\Delta x(t)]^2 = \overline{x^2}(t) - \overline{x}^2(t)$$

a abaterii pătratice medii a coordonatei de poziţie în raport cu pachetul de unde (de Broglie) definit de relaţiile (3.9)-(3.12).

Evoluţia valorii medii a coordonatei de poziţie ne este deja cunoscută fiind dată de relaţia (3.26). Valoarea medie a pătratului coordonatei de poziţie o definim cu totul analog formulei (3.13), adică

$$(4.30)\quad \overline{x^2}(t) = \frac{1}{N}\int x^2 \rho(x,t)\, dx,$$

obţinând astfel, prin utilizarea expresiei (3.11), formula

$$(4.31)\quad \overline{x^2}(t) = \frac{1}{N}\int \frac{dk'dk}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(k-k')x}\right] A^*(k')A(k)\exp\{i[\omega(k')-\omega(k)]t\}.$$

Din proprietatea de derivare a transformatei Fourier

$$(4.32)\quad \frac{d^2}{d\chi^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x)e^{i\chi x}\right] = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (ix)^2 f(x)e^{i\chi x}$$

rezultă, pentru $f(x)\equiv 1$, relaţia

$$(4.33)\quad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{i\chi x}x^2 = -\frac{d^2}{d\chi^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\chi x}\right] = -2\pi\delta''(\chi),$$

care aduce expresia (4.31) la forma

$$(4.34)\quad \overline{x^2}(t) = -\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, A(k)e^{-i\omega(k)t}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} d\chi\, \delta''(\chi)A^*(k-\chi)\exp[i\omega(k-\chi)t]\right\}.$$

Din relaţia de definiţie a derivatei de ordinul doi a funcţionalei $\delta(\chi)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta''(\chi)f(\chi)\, d\chi = \left[\frac{d^2 f}{d\chi^2}\right]_{\chi=0}$$

obţinem, prin considerarea funcţiei $f(\chi)$ sub forma

$$f(\chi) = A^*(k-\chi)\exp[i\omega(k-\chi)t]$$

şi calcularea celei de a doua derivate a ei în punctul $\chi=0$,

$$(4.35)\quad f''(0)=\left[\frac{d^2A^*}{dk^2}+it\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}A^*+2\frac{d\omega}{dk}\frac{dA^*}{dk}\right)-t^2A^*\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2\right]\cdot e^{i\omega(k)t}$$

următoarea formă, aproape finală, a expresiei (4.34)

$$(4.36)\quad \overline{x^2}(t)=-\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty}dk\frac{d^2A^*}{dk^2}A-\frac{it}{N}\int_{-\infty}^{\infty}dk\left[|A|^2\frac{d^2\omega}{dk^2}+2\frac{dA^*}{dk}A\frac{d\omega}{dk}\right]+$$

$$+\frac{t^2}{N}\int_{-\infty}^{\infty}dk|A|^2\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2.$$

Deoarece, la momentul $t=0$, ultimii doi termeni se anulează, rezultă că primul termen are semnificaţia valorii medii la momentul iniţial a pătratului coordonatei de poziţie

$$(4.37)\quad \overline{x^2}(0) = -\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,\frac{d^2A^*}{dk^2}A.$$

In acelaşi timp, inspectând forma integralei corespunzătoare ultimului termen din (4.36), observăm că, deoarece $|A(k)|^2$ reprezintă densitatea distribuţiei după impuls (în spaţiul vectorilor de undă), ultimul termen are exact semnificaţia valorii medii

$$(4.38)\quad <\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2> = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ |A(k)|^2\left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2$$

a pătratului vitezei de grup, multiplicată cu t^2. In ce priveşte integrala prezentată în al doilea termen, putem scrie

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \left[A^*A\frac{d^2\omega}{dk^2} + 2\frac{dA^*}{dk}A\frac{d\omega}{dk} \right] = \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[A^*A\frac{d^2\omega}{dk^2} + \frac{dA^*}{dk}A\frac{d\omega}{dk} + A^*\frac{dA}{dk}\frac{d\omega}{dk} \right] -$$

$$- \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[A^*\frac{dA}{dk}\frac{d\omega}{dk} - \frac{dA^*}{dk}A\frac{d\omega}{dk} \right]$$

adică

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk \left[|A|^2\frac{d^2\omega}{dk^2} + 2\frac{dA^*}{dk}A\frac{d\omega}{dk} \right] =$$

(4.39)

$$= \left[|A|^2\frac{d\omega}{dk} \right]_{k=-\infty}^{k=+\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dk \left[\frac{dA^*}{dk}A - A^*\frac{dA}{dk} \right]\frac{d\omega}{dk}.$$

Primul termen din membrul al doilea al relaţiei (4.39) este identic zero deoarece, funcţia de amplitudine $A(k)$ fiind din $\mathcal{L}^2(K)$ satisface condiţia

(4.40) $$\lim_{k\to\pm\infty} |A(k)|^2 = 0,$$

iar valoarea vitezei de grup a undelor de Broglie

(4.41) $$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(c\sqrt{k^2 + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2} \right) = \frac{ck}{\sqrt{k^2 + \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2}}$$

este egală cu viteza c a luminii la limita $k \to \pm\infty$. Prin luarea în considerare a rezultatelor (4.37)-(4.39), în baza observaţiilor (4.40) şi (4.41), expresia (4.36) devine

(4.42) $$\overline{x^2}(t) = \overline{x^2}(0) + \left\{ iN^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} dk \left[A^*\frac{dA}{dk} - \frac{dA^*}{dk}A \right]\cdot\frac{d\omega}{dk} \right\} t + \left\langle \left(\frac{d\omega}{dk}\right)^2 \right\rangle \cdot t^2.$$

Din legea de variaţie în timp a valorii medii a coordonatei de poziţie

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

$$\bar{x}(t) = \bar{x}(0) + \prec \frac{d\omega}{dk} \succ \cdot t$$

obţinem prin ridicare la pătrat

$$\overline{x^2}(t) = \overline{x^2}(0) + 2\bar{x}(0) \prec \frac{d\omega}{dk} \succ \cdot t + \left(\prec \frac{d\omega}{dk} \succ \right)^2 \cdot t^2,$$

ceea ce conduce, împreună cu (4.42), prin înlocuire în ecuaţia (4.29), la legea de evoluţie a abaterii pătratice medii a coordonatei de poziţie

$$(4.43) \quad [\Delta x(t)]^2 = \overline{x^2}(0) - \bar{x}^2(0) + \left\{ iN^{-1} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dk \left(A^* \frac{dA}{dk} - \frac{dA^*}{dk} A \right) \cdot \frac{d\omega}{dk} \right] - 2\bar{x}(0) \prec \frac{d\omega}{dk} \succ \right\} \cdot t + \left[\prec \left(\frac{d\omega}{dk} \right)^2 \succ - \left(\prec \frac{d\omega}{dk} \succ \right)^2 \right] \cdot t^2$$

adică

$$(4.44) \quad [\Delta x(t)]^2 = [\Delta x(0)]^2 + \gamma \cdot t + \left[\Delta \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \right]^2 \cdot t^2.$$

Alegând ca origine a timpului valoarea

$$(4.45) \quad t_0 = - \frac{\frac{\gamma}{2}}{\left[\Delta \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \right]^2},$$

termenul al doilea din membrul drept al ecuaţiei (4.44) va dispare şi obţinem în sfârşit ecuaţia

$$(4.46) \quad [\Delta x(t)]^2 = [\Delta x(0)]^2 + \left[\Delta \left(\frac{d\omega}{dk} \right) \right]^2 \cdot t^2,$$

care atestă caracterul general şi definitiv al procesului de destrămare. Interpretarea concretă a rezultatului (4.46) în cazul pachetului de unde de Broglie se obţine imediat dacă facem apel la forma relaţiei (4.41) în limita aproximaţiei nerelativiste

$$(4.47) \quad (\hbar k)^2 = p^2 \prec (m_0 c)^2$$

adică

BUCUREŞTI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(4.48)\quad \frac{d\omega}{dk} \cong \frac{\hbar k}{m_0} = \frac{p}{m_0}.$$

Din (4.48) rezultă expresia abaterii standard a vitezei de grup a undelor de Broglie

$$(4.49)\quad \Delta\left(\frac{d\omega}{dk}\right) = \frac{\Delta p}{m_0}$$

care conduce, prin înlocuire în ecuaţia (4.46), la forma nerelativistă a legii de variaţie a abaterii pătratice medii a coordonatei de poziţie pentru pachetul de unde asociate:

$$(4.50)\quad [\Delta x(t)]^2 = [\Delta x(0)]^2 + \frac{(\Delta p)^2}{m_0^2}\cdot t^2.$$

In această ecuaţie, mărimile $\Delta x(0)$ şi Δp nu sunt independente, ci satisfac principial relaţia de imprecizie dată de Heisenberg

$$(4.51)\quad \Delta x(0)\cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

astfel încât, coroborând rezultatele (4.50) şi (4.51), deducem că este imposibilă evitarea proprietăţii de lărgire a pachetului de unde de Broglie.

Pentru a ne face o idee mai clară asupra implicaţiilor ecuaţiei (4.50), să estimăm timpul necesar dublării abaterii pătratice medii, adică

$$(4.52)\quad \tau = m_0 \frac{\Delta x(0)}{\Delta p} \cong \frac{2m_0}{\hbar}[\Delta x(0)]^2,$$

întâi în cazul unui macroobiect de masă $m_0=10^{-6}kg$ şi extensiune spaţială $\Delta x(0)=10^{-3}\ m$ şi apoi în cazul unui electron, $m_0=9{,}1\cdot 10^{-31}\ kg$, care evoluează într-un domeniu de dimensiuni atomice $\Delta x(0)=10^{-10}\ m$. Din (4.52) rezultă pentru macroobiect "timpul de destrămare"

$$(4.52.a)\qquad \tau_M \cong 2\cdot 10^{22}\ (\text{sec.}),$$

în timp ce pentru electron, obţinem

$$(4.52.b)\qquad \tau_e \cong 2\cdot 10^{-16}\ (\text{sec.}).$$

Din (4.52.a,b) se desprind următoarele concluzii:

(i) caracterul ondulatoriu al microobiectelor, manifestat prin creşterea în timp a abaterilor standard de la traiectoriile clasice, este practic inobservabil, iar legea de mişcare a centrului de masă al pachetului de unde asociate descrie practic exact mişcarea reală a particulei macroscopice (clasice),

(ii) în cazul microobiectelor, caracterul ondulatoriu al acestora este cu totul hotărâtor. Mişcarea centrului de masă al pachetului de Broglie corespunde doar mişcării medii a microparticulei care va prezenta în permanenţă o abatere rapid evolutivă, de origine cuantică, de la traiectoria clasică.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL IV

ECUATIA SCHRÖDINGER SI MECANICA ONDULATORIE

"Primul pas cu care ne-am abătut de la fizica clasică a fost părăsirea descrierii cazurilor individuale ca evenimente obiective în spaţiu şi timp şi adoptarea metodei statisticii cuantice, furnizată de unda de probabilitate. O dată ce am păşit pe această cale, suntem obligaţi să ne adâncim în abstracţie...

In fizica cuantică nu este loc pentru legi care guvernează variaţiile în timp ale unui obiect individual. In locul lor avem legi care guvernează variaţiile în timp ale probabilităţii. Numai această schimbare fundamentală, introdusă în fizică de teoria cuantelor, a făcut posibilă explicarea adecvată a caracterului vădit discontinuu şi statistic al evenimentelor din domeniul fenomenelor prin care îşi manifestă existenţa cuantele de materie şi de radiaţie."

Albert Einstein şi Leopold Infeld[1]

[1] *Evoluţia fizicii*, Editura Tehnică, Bucureşti, 1957, pg.230-231

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Intre anii 1923 şi 1926, ipotezele de Broglie asupra caracterului dublu, corpuscular şi ondulatoriu, al microparticulelor au produs o adevărată revoluţie nu numai în afara conceptelor utilizate în fizica clasică ci şi, în mod cu totul remarcabil, chiar în sistemul de gândire abia consolidat al fizicii cuantice dezvoltate până atunci. Intr-adevăr, în cadrul metodei semiclasice de cuantificare, relaţiile Sommerfeld erau impuse unor sisteme fizice corpusculare ale căror mişcări de principiu puteau fi exprimate în termenii "tradiţionali" al formalismului mecanicii analitice. Ceea ce se obţinea în urma aplicării relaţiilor semiclasice de cuantificare era un sistem discret de traiectorii selecţionate, din mulţimea traiectoriilor clasic-posibile, aflate într-o corespondenţă directă cu şirurile de valori discrete ale diverselor mărimi observabile ce caracterizau stările legate ale sistemului fizic considerat. Cu alte cuvinte, ecuaţia Hamilton-Jacobi era pricipial valabilă, iar relaţiile de cuantificare formulate de Sommerfeld operau asupra integralei complete a acesteia, oferind astfel setul mişcărilor permise corespunzătoare stărilor staţionare, în sensul terminologiei introduse de Niels Bohr. Ori, după cum am demonstrat în ultimul paragraf al capitolului anterior, caracterul ondulatoriu al microobiectelor conduce, chiar şi în cel mai simplu caz, al microparticulei libere, la forma particulară (4.26) a relaţiilor de imprecizie (4.28) şi la ecuaţia nerelativistă (4.50) de lărgire a pachetului de unde asociate, care atestă imposibilitatea definirii exacte a noţiunii de traiectorie şi inoperabilitatea determinismului clasic în microcosmos.

IV.1. Justificarea ecuaţiei Schrödinger pe baza ipotezelor de Broglie şi a ecuaţiei d'Alembert

Concluziile menţionate în încheierea scurtei introduceri facută acestui capitol sunt cu mult prea ample pentru a fi consistent analizate în numai câteva rânduri. O asemenea tentativă nici nu ar fi posibilă deoarece cele două acte majore de renunţare, cum le numeşte Alfred Kastler, au reprezentat, în perioada premergătoare anului 1926, imboldul teoretic principal în dezvoltarea unei noi mecanici pentru sistemele microfizice, care să înlocuiască la scara dimensiunilor atomice mecanica clasică şi să explice efectele cuantice datorate naturii ondulatorii a materiei printr-un formalism coerent, bazat pe o nouă ecuaţie fundamentală. Necesitatea unei teorii mai largi, care să perfecţioneze vechea teorie a cuantelor, făcând apel, în mod esenţial, la caracterul dual al microobiectelor, a fost subliniată de însuşi Louis de Broglie care, având în vedere analogia ce există între mecanica hamiltoniană a punctului material şi optica geometrică, formulează ideea potrivit căreia, aşa precum optica geometrică este o aproximaţie a opticii ondulatorii, la fel este posibil ca mecanica clasică să fie o aproximaţie a unei mecanici "mai profunde", denumită de el Mecanica Ondulatorie.

Această nouă teorie, mecanica ondulatorie, a fost elaborată în cadrul unei serii de articole publicate în anul 1926, de către fizicianul austriac Erwin Schrödinger, care stabileşte pentru prima dată forma ecuaţiei de undă ce guvernează comportarea microparticulelor nerelativiste, lipsite de moment cinetic intern (adică de spin zero) [52-57].

A. ECUAŢIA SCHRÖDINGER "ATEMPORALA"

Să considerăm o particulă de masă m_0 care execută o mişcare nerelativistă sub acţiunea unui câmp conservativ ce îi conferă energia potenţială $V(\vec{x})$, unde $\vec{x}$ este vectorul de poziţie a particulei în raport cu referenţialul cartezian inerţial $\{ O\ x\ y\ z \}=\{ O\ x^1\ x^2\ x^3 \}$. Datorită caracterului conservativ, energia totală a particulei este constantă în decursul mişcării şi are, în cadrul aproximaţiei nerelativiste, expresia bine cunoscută

$$(1.1)\quad E = \frac{1}{2m_0}|\vec{p}|^2 + V(\vec{x}) \quad , \quad |\vec{p}|^2 = \delta_{ik}\, p^i p^k \quad cu \quad i,k=\overline{1,3},$$

unde $\{p^i\}_{i=\overline{1,3}}$ reprezintă componentele carteziene ale impulsului mecanic al particulei iar $(\delta_{ik})=diag(1,1,1)$ este tensorul metric fundamental care defineşte pătratul elementului de linie

$$dl^2 = \delta_{ik}\, dx^i dx^k$$

în spaţiul euclidian $\mathbb{R}^3$. Din (1.1), rezultă pentru modulul vectorului impuls, expresia

$$(1.2)\quad |\vec{p}| = [2m_0(E-V(\vec{x}))]^{1/2},$$

astfel încât, prin impunerea ipotezelor de Broglie, obţinem frecvenţa şi lungimea de undă a undei asociate particulei considerate:

$$(1.3)\quad \text{a)}\quad \nu = E/h$$

$$\text{b)}\quad \lambda = h[2m_0(E-V(\vec{x}))]^{-1/2}.$$

Spre deosebire de cazul microparticulei libere, când impulsul şi energia acesteia fiind constante conduceau, prin ipotezele de Broglie, la funcţia de undă

(1.4) $\Psi(\vec{x},t) : \mathbb{R}^3 x\ \mathbb{R} \to \mathbb{C}$

de forma undei plane şi monocromatice

$$\Psi(\vec{x},t) = A \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}\cdot\vec{x}-Et]\right\} \quad , \quad A = const \in \mathbb{C},$$

în cazul microparticulei în câmpuri conservative, deşi frecvenţa (1.3.a) este constantă, deci unda asociată rămâne monocromatică, lungimea de undă de Broglie (1.3.6) posedă, prin intermediul energiei potenţiale $V(\vec{x})$, o dependenţă spaţială explicită. Ca urmare, termenul de fază $\vec{p}\cdot\vec{x}$, corespunzător unei variaţii spaţiale de tip armonic, nu mai are nici un fel de justificare (vectorul de undă $\vec{k}=\vec{p}/\hbar$ ne mai fiind constant) şi funcţia de undă a microparticulei, într-un câmp conservativ, trebuie căutată sub forma

(1.5) $\Psi(\vec{x},t) = \psi(\vec{x})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \quad , \quad \psi(\vec{x}): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$

care să fie o soluţie a ecuaţiei d'Alembert

(1.6) $\Delta\Psi - \frac{1}{u^2}\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \quad , \quad cu \quad u(\vec{x})=\lambda(\vec{x})\cdot\nu \quad si \quad \Delta = \delta^{ik}\frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^k}.$

Ecuaţia Schrödinger "atemporală", denumită mai corect "ecuaţia Schrödinger pentru stările staţionare" (înţelegând prin aceasta stările de energie constantă ale microparticulei), se obţine din ecuaţia d'Alembert (1.6) prin utilizarea "formei de principiu" a funcţiei de undă (1.5) şi a relaţiilor de Broglie (1.3). In adevăr, din

(1.7) $\frac{1}{u^2} = \frac{1}{\lambda^2\nu^2} = \left[\frac{h}{\sqrt{2m_0(e-V(\vec{x}))}}\cdot\frac{E}{h}\right]^{-2} = \frac{2m_0}{E^2}(E-V(\vec{x}))$

rezultă, prin înlocuire în (1.6), ecuaţia

(1.8) $\Delta\Psi - \frac{2m_0}{E^2}[E-V(\vec{x})]\cdot\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$

în care vom explicita, pe baza formei de principiu (1.5), derivata a doua în raport cu timpul a funcţiei de undă a microparticulei. Obţinem

$$(1.9)\quad \frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \psi(\vec{x})\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\right] = -\frac{E^2}{\hbar^2}\psi(\vec{x})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = -\frac{E^2}{\hbar^2}\Psi(\vec{x},t),$$

ceea ce conduce, prin înlocuire în ecuaţia (1.8), la forma concretă a ecuaţiei Schrödinger pentru stările staţionare ale microparticulei de energie potenţială $V(\vec{x})$ şi energie totală (nerelativistă) E:

$$(1.10)\quad \Delta\Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E-V(\vec{x})]\Psi = 0.$$

Utilizând în (1.10) funcţia de undă staţionară (1.5), putem scrie

$$(1.11)\quad \left\{\Delta\psi(\vec{x}) + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E-V(\vec{x})]\psi(\vec{x})\right\}\cdot E^{-\frac{i}{\hbar}Et} = 0$$

de unde rezultă, în mod evident, ecuaţia Schrödinger atemporală pentru funcţia de amplitudine $\psi(\vec{x})$ a undei de Broglie staţionare, asociată particulei nerelativiste, de spin zero, aflată în câmp conservativ

$$(1.12)\quad \Delta\psi + \frac{2m_0}{\hbar^2}[E-V(\vec{x})]\Psi = 0.$$

B. ECUATIA SCHRÖDINGER TEMPORALA

In cazul stărilor nestaţionare, când energia totală (nerelativistă) şi energia potenţială a particulei sunt variabile în timp, justificarea directă a ecuaţiei Schrödinger pe baza ipotezelor de Broglie şi a ecuaţiei de undă a lui d'Alembert, care s-ar scrie

$$(1.13)\quad \Delta\psi - \frac{2m_0}{E^2(t)}[E(t)-V(\vec{x},t)]\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0$$

nu mai este posibilă deoarece, chiar dacă cunoaştem energia potenţială $V(\vec{x},t)$, nu putem specifica direct forma concretă a variaţiei în timp a

energiei totale a particulei. In mecanica clasică, în astfel de situaţii, determinarea funcţiei $E(t)$ se făcea simplu, prin integrarea ecuaţiilor de mişcare a particulei, adică prin obţinerea ecuaţiilor parametrice ale traiectoriei

$$(1.14)\quad x^i(t) = x^i(t;\, x_0^k, v_0^k) \quad , \quad i,k=\overline{1,3}$$

cu ajutorul cărora se calculează, din expresia

$$(1.15)\quad E(t) = \frac{m_0}{2}\left|\frac{d\vec{x}}{dt}(t)\right|^2 + V(\vec{x}(t),t),$$

valoarea energiei totale a particulei în orice moment t, în lungul traiectoriei corespunzătoare condiţiilor iniţiale, de tip Cauchy

$$(1.16)\quad \left\{ x^i(0)=x_0^i \;;\; v^i(0)=\dot{x}^i(0)=v_0^i \right\}_{i=\overline{1,3}}.$$

Dar, după cum am menţionat deja, atât pe larg, în paragraful III.4, cât şi foarte scurt în introducerea la acest capitol, legile mecanicii clasice, conceptul de traiectorie şi bazele determinismului laplaceian sunt complet inoperabile în descrierea comportării cuantice a microobiectelor.

In vederea obţinerii ecuaţiei lui Schrödinger pentru stările nestaţionare ale unei particule nerelativiste, lipsite de moment cinetic intern, va trebuim să căutăm, printre ecuaţiile obţinute la punctul **A**, acea formă a ecuaţiei de undă în care energia să intervină simplu, la puterea întâi, ca o constantă multiplicativă pe lângă funcţia de undă (1.5). Evident, aceasta este ecuaţia (1.10), pe care putem să o scriem sub forma

$$(1.17)\quad \Delta\Psi - \frac{2m_0}{\hbar^2}V(\vec{x})\Psi = -\frac{2m_0}{\hbar^2}E\Psi.$$

Dacă derivăm parţial, în raport cu timpul, funcţia de undă staţionară (1.5) obţinem pentru produsul $E\Psi$ expresia

$$E\Psi(\vec{x},t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

care conduce, prin substituire în ecuaţia (1.17), la eliminarea apariţiei explicite a energiei în ecuaţia de undă corespunzătoare stărilor nestaţionare, adică la rezolvarea formală a problemei determinării funcţiei $E(t)$, permiţând astfel postularea ecuaţiei Schrödinger temporale

$$(1.18)\quad \Delta\Psi(\vec{x},t) - \frac{2m_0}{\hbar^2}V(\vec{x},t)\cdot\Psi(\vec{x},t) = -\frac{2im_0}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t).$$

IV.2. Semnificaţia funcţiei de undă. Interpretarea probabilistă dată de Max Born

Raţionamentul efectuat pentru obţinerea ecuaţiei Schrödinger, atât în cazul stărilor staţionare, ecuaţia (1.12), cât şi în cazul stărilor nestaţionare, ecuaţia (1.18), reprezintă evident o justificare şi nu o demonstrare a acestei ecuaţii. In cele ce urmează, pentru a uşura exprimarea, în sensul nemenţionării de fiecare dată a ambelor ecuaţii (1.12) şi (1.18), ne vom referi la ecuaţia Schrödinger temporală pentru funcţia de undă generală (adică nu neapărat de forma (1.5)), $\Psi(\vec{x},t)$: $\mathbb{R}^3 x\ \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, deoarece, în cazul particular al stărilor staţionare, funcţia de undă (1.5) reduce automat ecuaţia (1.18) la ecuaţia (1.12) pentru funcţia de amplitudine $\psi(\vec{x})$ a undei asociate microparticulei. Sub forma (1.18), ecuaţia lui Schrödinger este postulată ca fiind ecuaţia fundamentală a "mecanicii cuantice nerelativiste a particulei scalare" (de spin zero), iar funcţiile de undă $\Psi(\vec{x},t)$, soluţii ale acestei ecuaţii, caracterizează complet, în cadrul unui formalism matematic abstract, dar deosebit de elegant (de care ne vom ocupa în capitolele următoare), stările cuantice ale microobiectului. A lămuri acum ce înseamnă "caracterizează complet", în sensul formalismului mecanicii ondulatorii elaborat odată cu aceasta de către Erwin Schrödinger, este încă mult prea devreme. Deocamdată, este mai important să stabilim interpretarea

corectă a funcţiei de undă asociate microparticulei, care va pune într-o lumină nouă semnificaţia undelor de Broglie, proprietăţile fundamentale ale pachetului de unde asociate şi trăsăturile esenţiale ale dualismului undă-corpuscul.

Relaţiile lui de Broglie sunt generalizări ale unor relaţii analoage a căror necesitate şi valabilitate au fost evidenţiate, după cum am văzut, în explicarea efectului Compton. Este natural, deci, să căutăm o semnificaţie a funcţiei de undă pentru undele luminoase, aptă de a fi generalizată pentru cazul microparticulelor. In acest sens, să stabilim legătura ce există între intensitatea luminoasă, expresie a caracterului ondulatoriu al luminii, şi numărul de fotoni, care exprimă natura corpusculară a radiaţiei. Evident, intensitatea luminoasă I este o funcţie de punct, în timp ce numărul de fotoni se referă la un volum ce cuprinde aceşti fotoni. De aceea, vom considera un volum $\Delta V=\Delta^3 x$ suficient de mic pentru a presupune că I este constantă în el. Fie ΔN numărul de fotoni din volumul ΔV. Este plauzibil atunci, să presupunem că ΔN este proporţional cu $I\Delta V$, adică

(2.1) $\Delta N \sim I\Delta V = I\Delta^3 x$

deoarece, fixând ΔV, creşterea intensităţii luminoase (caracteristică ondulatorie) va corespunde direct creşterii numărului de fotoni ΔN (caracteristică corpusculară). Luând cazul cel mai simplu, al propagării în vid a undelor electromagnetice sferice, vectorul inducţiei magnetice $\vec{B}$ este ortogonal pe vectorul $\vec{E}$ al intensităţii câmpului electric şi are modulul

(2.2) $|\vec{B}| = \frac{1}{c}|\vec{E}| \Leftrightarrow B=\frac{1}{c}E.$

Ca urmare, pentru modulul vectorului Poynting vom putea scrie relaţia

(2.3) $S = \frac{1}{\mu_0}|\vec{E}x\vec{B}| = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\,E^2,$

din care deducem, utilizând "reprezentarea în complex"

(2.4) $\underline{E}(\vec{x},t) = \underline{E}(\vec{x})e^{-i\omega t}$

a intensităţii câmpului electric, expresia valorii medii pe timp de o perioadă a modulului vectorului Poynting al undei

(2.5) $<S> = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\,\underline{E}^*(\vec{x},t)\underline{E}(\vec{x},t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}\,|\underline{E}(\vec{x},t)|^2.$

Deoarece intensitatea luminoasă I este proporţională cu valoarea medie $<S>$ a vectorului Poynting, rezultă, din relaţiile (2.1) şi (2.5), următoarea relaţie de directă proporţionalitate

(2.6) $\Delta N \sim |\underline{E}(\vec{x},t)|^2\,\Delta^3x$

între numărul de fotoni din volumul ΔV şi modulul pătrat al intensităţii câmpului electric al undei electromagnetice. Sub aspect calitativ, importanţa acestei relaţii este deosebită deoarece, considerând în locul câmpului electromagnetic un câmp fizic oarecare $\Psi(\vec{x},t)$, ea stabileşte o legătură de principiu între cele două caractere, corpuscular şi ondulatoriu, ale entităţii fizice descrise de funcţia $\Psi(\vec{x},t)$, anume

(2.7) $\Delta N \sim |\Psi(\vec{x},t)|^2\,\Delta^3x,$

ceea ce înseamnă, la acest nivel al discuţiei noastre, că numărul de particule ce se găsesc în volumul ΔV, la momentul t, este proporţional cu pătratul modulului funcţiei $\Psi(\vec{x},t)$.

Este important să observăm, referitor la relaţia (2.7), că nu am făcut nici o afirmaţie cu privire la faptul că funcţia $\Psi(\vec{x},t)$ ar fi identică cu funcţia de undă, soluţie a ecuaţiei Schrödinger, asociată microparticulei. Dacă încercăm să facem o asemenea afirmaţie ne lovim de două dificultăţi insurmontabile:

(i) Funcţia de undă asociată microparticulei este în mod esenţial o funcţie complexă de variabile reale deci nu este o mărime fizică direct măsurabilă. Funcţia de undă de Broglie-Schrödinger $\Psi(\vec{x},t)$ este o expresie matematică (abstractă) prin intermediul căreia, în cadrul formalismului mecanicii ondulatorii, se calculează valorile reale ale mărimilor observabile.

(ii) Ecuaţia Schrödinger (1.18), ca şi forma ei staţionară (1.12), se referă prin însăşi modul ei de formulare la unda asociată unei singure microparticule. Deci, considerarea "ad litteram" a relaţiei (2.7), cu $\Psi(\vec{x},t)$ drept funcţia de undă de Broglie a microobiectului, nu este aprioric justificată deoarece nu ştim şi nu este deloc evident ce înseamnă "numărul de particule ΔN" când de fapt, funcţia de undă de Broglie se referă în mod clar la o singură microparticulă.

Inspirat de forma relaţiei (2.7), dar analizând-o critic în sensul observaţiilor (i), (ii) şi a rezultatelor experimentale obţinute de Taylor (1909) în studiul difracţiei fasciculelor de lumină de intensitate foarte redusă, Max Born formulează în anul 1926 vestita interpretare probabilistă a funcţiei de undă $\Psi(\vec{x},t)$ [5, 6], ale cărei consecinţe au fost minuţios verificate şi strălucit confirmate de către G.P. Thomson, în 1928, în studiul experimental al difracţiei unui fascicul electronic de foarte mică intensitate.

Pornind de la concluzia desprinsă din experienţele efectuate de Taylor, că "figura de difracţie" este independentă de intensitatea fasciculului de fotoni incidenţi, Max Born admite ipoteza că această proprietate rămâne valabilă şi în cazul difracţiei unui fascicul de microparticule, adică fiecare particulă este supusă difracţiei în mod independent de celelalte.

In baza acestei ipoteze rezultă că dacă trimitem microparticulă după microparticulă pe dispozitivul ce produce difracţia, structura

difractogramei va fi aceeaşi cu cea corespunzătoare împrăştierii pe dispozitivul de difracţie a unui fascicul intens, alcătuit din acelaşi tip de microparticule. Astfel, dacă supunem difracţiei un fascicul de N microparticule identice, în regim "microparticulă după microparticulă", totul se petrece ca şi cum procesul de împrăştiere uniparticulă este repetat de N ori în condiţii identice. In această situaţie, a împrăştierii uniparticulă, $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ este corect definit, în acord cu observaţia (ii), ceea ce conduce la concluzia că

$$\Delta N \sim |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, \Delta^3 x$$

este numărul de cazuri în care particula se găseşte în volumul ΔV la momentul t. Deocamdată, făcând abstracţie de constrângerea "la momentul t", să observăm că $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ are o interpretare statistică şi în consecinţă, mecanica cuantică este o teorie esenţialmente statistică, chiar şi în cazul când este vorba de un microobiect.

Problema care o crează specificare "la momentul t" constă în aceea că numărarea cazurilor când particula se găseşte în volumul $\Delta^3 x$ se face în decursul timpului adică, plasând un detector în volumul $\Delta^3 x$, el va număra, din cele N microparticule identice difractate una după alta, cele ΔN particule ajunse în volumul ΔV, la momentele $t_1 < t_2 < ... < t_{\Delta N}$, deci cele ΔN cazuri nu pot fi numărate, din punct de vedere experimental, instantaneu, la momentul t.

In cazul fasciculelor de microparticule utilizate concret în experimente de difracţie, acestea sunt monocinetice, adică sunt alcătuite din microparticule identice aflate în stări staţionare de aceeaşi energie. Ca urmare, funcţia de undă de Broglie are expresia (1.5) şi astfel mărimea $|\Psi(\vec{x},t)|^2 = |\psi(\vec{x})|^2$ este independentă de timp, întregul fenomen având un caracter staţionar şi deci nu are importanţă faptul că cele ΔN

cazuri corespunde unor momente $t_1,...,t_{\Delta N}$ diferite. In contextul acestei "situaţii de staţionaritate", Max Born face o observaţie remarcabilă : raportul $\Delta N/N$ înseamnă "număr de cazuri favorabile supra număr de cazuri posibile" deci, pentru N suficient de mare, are semnificaţia unei probabilităţi

$$(2.8) \quad \Delta \mathcal{P} = \frac{\Delta N}{N} = |\psi(\vec{x})|^2 \, \Delta^3 x$$

anume aceea de a găsi particula în volumul ΔV. Cum despre probabilitatea de realizare a unui eveniment, la un moment oarecare t, se poate vorbi "fără probleme", rezultă că, în cazul general al stărilor nestaţionare ale unei microparticule, relaţia (2.8) se generalizează foarte simplu

$$(2.9) \quad \Delta \mathcal{P}(t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, \Delta^3 x$$

şi reprezintă expresia matematică a interpretării probabiliste date de Max Born:

> *pătratul modulului funcţiei de undă într-un punct al spaţiului, la momentul t , este proporţional cu probabilitatea de prezenţă a microparticulei în acel punct şi la acel moment.*

Ecuaţia Schrödinger fiind liniară şi omogenă, rezultă că, împreună cu o soluţie a ei $\Psi(\vec{x},t)$ şi $a\Psi(\vec{x},t)$ este de asemenea o soluţie, unde "a" este o constantă complexă oarecare. Astfel, dacă funcţia de undă de Broglie-Schrödinger este pătratic integrabilă, adică

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, d^3x < \infty$$

(integrala fiind deci extinsă pe întregul spaţiu $\mathbb{R}^3$), putem fixa constanta multiplicativă "a" prin impunerea condiţiei de normare

(2.10) $\int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \Psi \, d^3x = 1$

care, practic, asigură interpretarea propusă de Max Born, deoarece probabilitatea de a găsi particula undeva în întregul spaţiu este o certitudine. In baza condiţiei de normare şi a formei de principiu a relaţiei (2.9), putem restrânge integrala, de la spaţiul $\mathbb{R}^3$, la un domeniu D din $\mathbb{R}^3$, ceea ce conduce la expresia probabilităţii de localizare a particulei în domeniul $D \subset \mathbb{R}^3$, la momentul t

(2.11) $\wp[D](t) = \int_D |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, d^3x$

şi la "exprimarea locală" a semnificaţiei funcţiei de undă în interpretarea dată de Max Born, anume

(2.12) $|\Psi(\vec{x},t)|^2 = \rho(\vec{x},t) = \lim_{Vol(D)\to 0} \{[Vol(D)]^{-1} \wp[D](t)\}$, cu $Vol(D) = \int_D d^3x$,

reprezintă densitatea de probabilitate a prezenţei particulei la momentul t în punctul de coordonate $(x^i)_{i=\overline{1,3}}$ din $\mathbb{R}^3$.

Interpretarea probabilistică rezolvă într-un cadru conceptual nou toate problemele ridicate de modelul de identificare a microparticulei cu pachetul de unde asociate. Unda de Broglie, fiind o undă de probabilitate, caracterizează mişcările posibile ale microparticulei, iar densitatea (2.12) deşi este "matematic" aceeaşi cu densitatea (III.3.1) de distribuţie în spaţiu a pachetului de unde de Broglie, este o densitate de probabilitate şi nu o densitate fizică, efectivă, de distribuţie în spaţiu a particulei. Pentru o funcţie de undă a pachetului de Broglie de forma (III.4.5), care conduce la densitatea normată (III.4.15), comparând formulele (2.11) şi (III.4.21), pentru $D=S$, observăm că mărimea $\wp[S]$ reprezintă de fapt probabilitatea de a găsi particula în domeniul S. Astfel, ceea ce numim în paragraful III.4 "ponderea pachetului în zona de acţiune a microparticulei" este o mărime probabilistă care interzice

identificarea particulei cu zona ei de acţiune, adică localizarea cu certitudine a microobiectului în zona S a maximului principal al pachetului de Broglie.

In concluzie, interpretarea propusă de Max Born nu numai că păstrează valabilitatea proprietăţilor generale ale pachetului de unde asociate, mişcarea inerţială a "centrului de masă" şi legea de evoluţie a abaterilor standard de la traiectoria medie, dar în acelaşi timp elimină contradicţia principală a modelului de Broglie-Schrödinger referitoare la stabilitatea particulei în pofida destrămării pachetului. Variaţia temporală a funcţiei de undă $\Psi(\vec{x},t)$ modifică probabilitatea localizării în spaţiu a particulei şi nici de cum structura fizică a acesteia. Lărgirea pachetului de unde asociate exprimă creşterea în timp a impreciziei în localizarea microobiectului pe traiectoria clasică, neavând nici o legătură cu (şi neexistând) vreo deformare fizică a configuraţiei geometrice a particulei, care rămâne punctuală.

IV.3. Ecuaţia de continuitate a "fluidului" de probabilitate

Interpretarea probabilistă a funcţiei de undă conduce la ideea că pachetul de unde de Broglie, asociat unei microparticule, poate fi privit ca un fluid de probabilitate cu densitatea $\rho(\vec{x},t)=|\Psi(\vec{x},t)|^2$. Această imagine intuitiv semiclasică, dar de natură eminamente cuantică, sugerează prin analogie cu cazul fluidelor reale investigarea formulării unei ecuaţii de continuitate pentru acest fluid "special". Dacă o asemenea ecuaţie există într-adevăr, atunci ea va reprezenta exprimarea locală a unei legi fundamentale a mecanicii ondulatorii (şi în cazul general a mecanicii cuantice) anume, legea de conservare a probabilităţii de prezenţă în spaţiu a particulei.

Că tentativa de stabilire a unei legi de conservare pentru fluidul

de probabilitate nu este lipsită de temei, ne-o demonstrează cazul microparticulei nerelativiste, libere, cu funcţia de undă asociată

$$(3.1)\quad \Psi(\vec{x},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\frac{d^3p}{\hbar^3}A(\vec{p})\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\cdot\vec{x}-\frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}t\right]\right\}.$$

Pentru variaţia în timp a densităţii de probabilitate corespunzătoare funcţiei de undă (3.1), obţinem

$$(3.2)\quad \frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3p'd^3p}{\hbar^6}A^*(\vec{p}')\cdot A(\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}\left[(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}-\left(\frac{|\vec{p}'|^2}{2m_0}-\frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\right)t\right]}\right\},$$

adică

$$(3.3)\quad \frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}=\frac{i}{2m_0\hbar}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{d^3p'd^3p}{\hbar^6}A^*(\vec{p}')A(\vec{p})\cdot[|\vec{p}'|^2-|\vec{p}|^2]e^{\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}-\left(\frac{|\vec{p}'|^2}{2m_0}-\frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\right)t\right]\right\}}.$$

Pentru variaţia în timp a probabilităţii de a găsi particula într-un punct oarecare din spaţiu, avem relaţia generală

$$(3.4)\quad \frac{d}{dt}\wp[\mathbb{R}^3](t)=\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\partial\rho(\vec{x},t)}{\partial t}\cdot d^3x$$

care revine, prin înlocuirea expresiei (3.3), la forma concretă

$$(3.5)\quad \frac{d}{dt}\wp[\mathbb{R}^3](t)=\frac{i}{2m_0\hbar}\frac{1}{(2\pi^3)}\int\frac{d^3p'd^3p}{\hbar^6}A^*(\vec{p}')A(\vec{p})[|\vec{p}'|^2-|\vec{p}|^2]\cdot\left\{\int d^3x\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}\right]\right\}\cdot\exp\left\{+\frac{i}{\hbar}\left[\frac{|\vec{p}'|^2}{2m_0}-\frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\right]t\right\},$$

BCU STIINTIFICA UNIVERSITY LIBRARY

în care observăm că integrala peste $\mathbb{R}^3$ exprimă de fapt reprezentarea Fourier a funcţionalei δ - Dirac

$$(3.6)\quad \int d^3x\, \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}\right] = (2\pi\hbar)^3\,\delta(\vec{p}'-\vec{p})\,.$$

Rezultă astfel

$$(3.7)\quad \frac{d}{dt}\wp[\mathbb{R}^3](t) = \frac{i}{2m_0\hbar}\int d^3p'd^3p\;\delta(\vec{p}'-\vec{p})[|\vec{p}'|^2-|\vec{p}|^2]$$
$$\cdot A^*(\vec{p}')A(\vec{p})\cdot\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{|\vec{p}'|^2}{2m_0}-\frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\right)\right]\equiv 0,$$

adică legea de conservare a probabilităţii de existenţă în spaţiu a microparticulei libere. Dacă amplitudinea $A(\vec{p})$ în spaţiul impulsurilor este o funcţie pătratic integrabilă

$$\int_K d^3p\;|A(\vec{p})|^2 < \infty,$$

atunci integrala pe tot spaţiul $\mathbb{R}^3$ a densităţii de probabilitate $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ există

$$\int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(\vec{x},t)|^2 d^3x =$$
$$=\int\frac{d^3p'd^3p}{\hbar^3}\,A^*(\vec{p}')A(\vec{p})\;\delta(\vec{p}'-\vec{p})\;\exp\left[\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{|\vec{p}'|^2-|\vec{p}|^2}{2m_0}t\right],$$

adică

$$(3.8)\quad \int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(\vec{x},t)|^2\,d^3x = \int_K\frac{d^3p}{\hbar^3}|A(\vec{p}')|^2 < \infty$$

şi se "calibrează la unitate" în acord cu condiţia de normare (2.10), care asigură interpretarea probabilistă. Din (3.7,8) şi (2.10) rezultă $\wp[\mathbb{R}^3](t)\equiv 1$ pentru $\forall t\in(-\infty,\infty)$ adică, în mecanica cuantică nerelativistă,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

existenţa undeva în întregul spaţiu a microparticulei libere este în mod constant o certitudine.

Pentru obţinerea ecuaţiei de continuitate a fluidului de probabilitate, în cazul mai general al microparticulei (nerelativiste, de spin zero) supusă acţiunii unui câmp de forţe, să folosim ecuaţia Schrödinger temporală şi forma complex conjugată a acesteia:

$$(3.9)\quad \begin{aligned} &a)\ \Delta\Psi - \frac{2m_0}{\hbar^2}V\Psi = -\frac{2im_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \\ &b)\ \Delta\Psi^* - \frac{2m_0}{\hbar^2}V\Psi^* = \frac{2im_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}. \end{aligned}$$

Să înmulţim cu Ψ^* ambii membri ai ecuaţiei (3.9.a), cu Ψ ambii membri ai ecuaţiei (3.9.b) şi să scădem "membru cu membru" ecuaţiile astfel obţinute. Rezultă ecuaţia

$$(3.10)\quad \Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^* = -\frac{2im_0}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi),$$

pe care o transcriem sub forma

$$(3.11)\quad \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) - \frac{i\hbar}{2m_0}[\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*] = 0.$$

In baza identităţii Green

$$(3.12)\quad \Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^* = \nabla\cdot[\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*]$$

obţinem, prin înlocuire în (3.11), forma concretă a ecuaţiei de continuitate

$$(3.13)\quad \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) + \nabla\cdot\left\{\frac{i\hbar}{2m_0}[(\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\nabla\Psi)]\right\} = 0,$$

care scoate în evidenţă densitatea curentului de probabilitate

$$(3.14)\quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_0}[(\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\nabla\Psi)]$$

şi exprimă local legea de conservare a probabilităţii în mecanica cuantică nerelativistă a particulei scalare:

(3.15) $$\frac{\partial}{\partial t}\left\{\int_D |\Psi(\vec{x},t)^2 dV\right\} = -\oint_{\partial D} \vec{j}\cdot d\vec{\Sigma}$$

(oricare ar fi domeniul $D\subset\mathbb{R}^3$ cu închidere $\overline{D}$ compactă şi frontiera ∂D netedă pe porţiuni).

IV.4. Condiţiile de selectare a soluţiilor fizic acceptabile ale ecuaţiei Schrödinger

Problema impunerii unor condiţii fizico-matematice suplimentare funcţiei de undă de Broglie-Schrödinger provine din faptul că nu toate soluţiile ecuaţiei Schrödinger au sens fizic. Ca o justificare imediată a acestei afirmaţii se pot da următoarele două exemple destul de simple.

(i) Soluţia statică pentru particula liberă în domeniul spaţial, unidimensional $\mathbb{R}$.

In cazul static, unidimensional, $\Psi(\vec{x},t)=\psi(x)$, al microparticulei libere, $V(\vec{x},t)\equiv 0$, ecuaţia Schrödinger (1.18) se reduce la ecuaţia diferenţială de ordinul II liniară şi omogenă

(4.1) $$\frac{d^2\psi}{dx^2} = 0,$$

a cărei soluţie generală, în clasa funcţiilor complexe de variabilă reală, este

(4.2) $$\psi(x) = a+bx \quad , \quad cu\ a,b\in\mathbb{C}.$$

Comparând ecuaţia (4.1) cu ecuaţia lui Schrödinger (1.12), cu $V\equiv 0$, observăm că ele sunt identice dacă energia cinetică a particulei $E_c=E$

(în acest caz), este zero, adică soluţia (4.2) ar reprezenta "funcţia de undă" asociată particulei în repaus. Din punct de vedere fizic, funcţia de undă (4.2) cu $b\neq 0$ este total inacceptabilă deoarece conduce la o densitate de probabilitate

(4.3) $\rho(x)=|\psi(x)|^2 \sim |b|^2 \cdot x^2$

infinită la infinitul spaţial $x\to\pm\infty$. Oricât ne-am strădui, unui asemenea rezultat nu-i putem găsi nici o interpretare fizică. Impunerea condiţiei

(4.4) $b=0$,

care elimină comportarea asimptotică nefizică (4.3), atrage după sine un alt rezultat straniu : microparticula în repaus este prezentă cu egală densitate de probabilitate

(4.5) $\rho(x)=|a|^2$

în toate punctele spaţiului. Dacă microparticula ar fi fost în mişcare $E_c=E>0$, ea ar fi putut parcurge toate punctele din $\mathbb{R}$ şi oarecum natural, mişcarea fiind inerţială, ar fi trecut cu egală probabilitate prin fiecare punct al spaţiului, adică cel puţin formal, o expresie de forma (4.5) pentru densitatea de probabilitate ar fi fost justificabilă. Dar în cazul static pe care îl discutăm, rezultatul (4.5), cu $a\neq 0$, este inacceptabil. Dacă particula se află în repaus, ea se va găsi în orice moment în acelaşi punct x_0 din $\mathbb{R}$, sau într-un interval Δx, centrat pe x_0 din $\mathbb{R}$ şi, atunci, cum se mai poate găsi cu egală probabilitate, în aceleaşi momente, în toate celelalte puncte ale spaţiului? Rezolvarea acestei probleme are la bază interpretarea probabilistă a funcţiei de undă şi forma de principiu

(4.6) $\Delta x \cdot \Delta p \sim h$

a relaţiei lui Heisenberg. In adevăr, să considerăm microparticula localizată în orice moment în intervalul de lărgime Δx în jurul punctului $x_0\in\mathbb{R}$ astfel încât, sub aspect semnificativ, funcţia de undă

asociată ar avea forma

$$(4.7)\quad \psi(x) = \begin{cases} 0 \ , & x < x_0 - \dfrac{\Delta x}{2} \\ a \neq 0 \ , & x_0 - \dfrac{\Delta x}{2} \le x \le x_0 + \dfrac{\Delta x}{2} \\ 0 \ , & x > x_0 + \dfrac{\Delta x}{2}. \end{cases}$$

Lăsând deocamdată la o parte problema continuităţii funcţiei de undă, să impunem "soluţiei" (4.7) condiţia de normare (2.10), adică

$$(4.8)\quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = |a|^2 \int_{x_0-\frac{\Delta x}{2}}^{x_0+\frac{\Delta x}{2}} dx = 1,$$

de unde rezultă pentru constanta $a \in \mathbb{C}$ expresia

$$(4.9)\quad a = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{\Delta x}} \ , \quad cu\ \alpha \in \mathbb{R},$$

care devine, prin utilizarea relaţiei (4.6),

$$(4.10)\quad a = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{h}} \cdot (\Delta p)^{1/2}.$$

Deoarece în cazul static, cu $V(x)=0$, energia cinetică este identic nulă, impulsul mecanic al particulei, având valoarea zero, este perfect determinat şi astfel, imprecizia Δp în măsurarea valorii impulsului este de asemenea nulă, adică

$$(4.11)\quad \Delta p = 0.$$

Din (4.11), (4.10) şi (4.7) obţinem

$$(4.12)\quad \psi(x) \equiv 0$$

adică, singura soluţie statică, fizic acceptabilă, a ecuaţiei Schrödinger pentru microparticula liberă este soluţia banală.

Am văzut astfel cum, din clasa de soluţii statice (4.2) ale

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ecuaţiei (4.1), condiţia de mărginire în tot spaţiul a funcţiei de undă, împreună cu imposibilitatea determinării simultane, cu precizie absolută, a coordonatei şi impulsului particulei, $\{x,p_x\}$, au selectat soluţia banală ca singura soluţie fizică, având ca semnificaţie faptul că, în microcosmos nici o particulă liberă nu poate fi surprinsă, în mod exact, în stare de repaus.

(ii) O funcţie pătratic integrabilă, nemărginită la infinit.

Fie n un număr natural şi să considerăm în planul xOy punctele $(n-2^{-2n}, 0)$, $(n, 2^n)$ şi $(n+2^{-2n}, 0)$. Aceste puncte determină un triunghi isoscel cu aria $A_n = 2^{-n}$. Să presupunem că am efectuat această construcţie pentru fiecare $n\in\mathbb{N}$ şi să definim $|\psi(x)|^2$ ca fiind laturile acestor triunghiuri, exceptând bazele, iar în afara bazelor şi de asemenea pentru $x\le 3/4$, considerăm $\psi(x)=0$. Rezultă atunci

$$(4.13)\quad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} A_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 1,$$

deci $\psi(x)\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ dar este nemărginită pentru $x=n\to\infty$ deoarece

$$(4.14)\quad |\psi(n)| = 2^{n/2},$$

pentru $n\in\mathbb{N}$, poate fi oricât de mare. Acest exemplu ne arată că deşi interpretarea probabilistă dată de Max Born este asigurată de condiţia de normare (2.10), care în acest caz ia forma (4.13), ea nu reprezintă de la sine şi o garanţie a sensului fizic al funcţiei de undă, deoarece, chiar spaţiul $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ este prea larg, din punct de vedere fizic, conţinând şi funcţii divergente la infinit. Astfel, soluţiile fizice din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ale ecuaţiei Schrödinger în $(1+1)$-dimensiuni (adică spaţiu real unidimensional + timpul) trebuie să satisfacă la infinitul spaţial condiţia suplimentară

(4.15) $\lim_{x\to\pm\infty} \Psi(x,t) = 0 \ , \quad \forall\, t\in(-\infty,\infty)$.

Din cele două exemple rezultă prima condiţie generală de selectare a soluţiilor fizic acceptabile ale ecuaţiei Schrödinger:

1) Semnificaţia funcţiei de undă cere ca $\Psi(\vec{x},t) : \mathbb{R}^3 x\ \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ să fie o funcţie mărginită în orice compact $D\subset\mathbb{R}^3$, la orice moment $t\in\mathbb{R}$, deoarece integrala

$$\wp[D](t) = \int_D |\Psi(\vec{x},t)|^2\, d^3x$$

trebuie să fie finită.

Următoarea condiţie importantă, de asemenea cu caracter general, care se impune funcţiei de de undă este condiţia de continuitate spaţio-temporală,

2) "Soluţia fizică" a ecuaţiei Schrödinger trebuia să fie continuă peste tot în domeniul 4-dimensional $\mathbb{R}^3 x[0,\infty)$.

Această condiţie decurge direct din necesitatea valabilităţii "universale" (în toate punctele din $\mathbb{R}^3 x[0,\infty)$) a ecuaţiei de continuitate (3.13). Pentru demonstraţie, să considerăm funcţia de undă $\Psi(\vec{x},t)$ mărginită pe $\mathbb{R}^3 x[0,\infty)$, dar să presupunem că ea este de clasă C^2 aproape peste tot în $\mathbb{R}^3$ şi de clasă C^1 aproape peste tot în $[0,\infty)$, având discontinuităţi de speţa I (cu salt finit) atât pe suprafaţa $\Sigma\subset\mathbb{R}^3$, închisă sau cu bord şi de clasă C^1 pe porţiuni, cât şi la momentul $t_0\in[0,\infty)$. Conform Teoriei Distribuţiilor, gradientul, laplaceianul şi derivata

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITARĂ "M. EMINESCU" IAŞI

parţială în raport cu timpul ale funcţiei de undă vor fi date de expresiile [66]

a) $$\nabla\Psi = \underline{\nabla\Psi} + [\Psi]_\Sigma \, \delta(\vec{x},\vec{x}_0;\Sigma)\vec{n}$$

(4.16) b) $$\Delta\Psi = \underline{\Delta\Psi} + \vec{n}\cdot[\nabla\Psi]_\Sigma \, \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) - [\Psi]_\Sigma \cdot \sum_{i=1}^{3}\left(x^i-x_0^i\right)^{-1}\cdot \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma)$$

c) $$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \underline{\frac{\partial\Psi}{\partial t}} + [\Psi]_{t_0}\delta(t-t_0),$$

în care s-au utilizat următoarele notaţii:

(i) $\underline{\nabla\Psi}$: partea regulată a gradientului funcţiei de undă

(ii) $\underline{\Delta\Psi}$: partea regulată a laplaceianului funcţiei $\Psi(\vec{x},t)$

(iii) $\underline{\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$: partea regulată a derivatei parţiale temporale a lui $\Psi(\vec{x},t)$

(iv) $[\Psi]_\Sigma$: saltul funcţiei de undă pe suprafaţa Σ (după normala $\vec{n}$)

(v) $[\nabla\Psi]_\Sigma$: saltul gradientului funcţiei de undă pe Σ

(vi) $[\Psi]_{t_0}$: saltul funcţiei de undă la momentul t_0

(vii) $\delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma)$: funcţionala Dirac "superficială" egală cu zero peste tot în afara suprafeţei Σ şi infinită în toate punctele $(\vec{x}_0)$ ale lui Σ

(viii) $\delta(t-t_0)$: funcţionala Dirac "temporală" egală cu zero în orice moment $t\neq t_0$ şi infinită la momentul t_0.

Pentru a justifica necesitatea continuităţii temporale a funcţiei de undă, să considerăm un punct oarecare $(x)\in \mathbb{R}^3-\Sigma$ şi să integrăm ecuaţia de continuitate (3.13) între momentele infinitezimal apropiate $t_0-\eta$

şi $t_0+\eta$. Obţinem ecuaţia

$$\int_{t_0-\eta}^{t_0+\eta}\left\{\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}+[\Psi^*]_{t_0}\delta(t-t_0)\right]\Psi+\Psi^*\left[\frac{\partial\Psi}{\partial t}+[\Psi]_{t_0}\delta(t-t_0)\right]\right\}dt+$$

$$+\frac{i\hbar}{2m_0}\int_{t_0-\eta}^{t_0+\eta}[(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)]\,dt=0, \tag{4.17}$$

adică

$$\int_{t_0-\eta}^{t_0+\eta}\left\{\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right]+\frac{i\hbar}{2m_0}[(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)]\right\}dt+$$

$$+[\Psi^*]_{t_0}\Psi(\vec{x},t_0)+\Psi^*(\vec{x},t_0)[\Psi]_{t_0}=0. \tag{4.18}$$

Din faptul că Ψ,Ψ^* şi părţile regulate $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$, $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$, $\Delta\Psi$, $\Delta\Psi^*$ sunt mărginite pe $\mathbb{R}^3x[0,\infty)$ şi aparţin diverselor clase de continuitate pe $[0,t_0)\cup(t_0,\infty)$, adică $C^1([0,t_0))\cup C^1((t_0,\infty))$ pentru Ψ, Ψ^*, $\Delta\Psi$, $\Delta\Psi^*$ şi $C([0,t_0))\cap C((t_0,\infty))$ pentru $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ şi $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$, rezultă

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{t_0-\eta}^{t_0+\eta}\left\{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{i\hbar}{2m_0}[(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)]\right\}dt=$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\int_{t_0-\eta}^{t_0-0}\left\{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{i\hbar}{2m_0}[(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)]\right\}+$$

$$+\int_{t_0+0}^{t_0+\eta}\left\{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{i\hbar}{2m_0}[(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)]\right\}dt=0 \tag{4.19}$$

BCU IAŞI FILIALA UNIVERSITY LIBRARY

astfel încât, din (4.18) pentru $\eta \to 0$ obţinem condiţia de anulare a saltului funcţiei de undă la momentul t_0:

$$[\Psi]_{t_0} = \Psi(\vec{x},t_0+0) - \Psi(\vec{x},t_0-0) \equiv 0$$

(4.20)

$$[\Psi^*]_{t_0} = \Psi^*(\vec{x},t_0+0) - \Psi(\vec{x},t_0-0) \equiv 0,$$

ceea ce înseamnă de fapt că $\Psi(\vec{x},t)$ este continuă pe $[0,\infty)$ şi de clasă C^1 la orice moment cu excepţia momentului t_0, iar relaţia (4.20) devine

$$(4.21)\quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} \leftrightarrow \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}.$$

Utilizând (4.21) şi (4.16.b) să integrăm ecuaţia de continuitate (3.13) pe un domeniu $D \subset \mathbb{R}^3$ de volum infinitezimal, care conţine suprafaţa Σ, şi să "luăm limita" $vol(D) \to 0$, adică

$$(4.22)\quad \lim_{Vol(D)\to 0} \left\{ \int_D \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) d^3x + \frac{i\hbar}{2m_0} \int_D \{(\Delta\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\Delta\Psi)\} d^3x \right\} = 0,$$

de unde rezultă ecuaţia

$$\lim_{Vol(D)\to 0} \left\{ \int_D \left\{ \Delta\Psi^* + \vec{n}\cdot[\nabla\Psi^*]_\Sigma \, \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) - \right.\right.$$

$$\left. - [\Psi^*]_\Sigma \cdot \sum_{i=1}^{3} \left(x^i - x_0^i\right)^{-1} \cdot \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) \right\} \Psi \, d^3x -$$

(4.23)

$$- \int_D \Psi^* \left\{ \Delta\Psi + \vec{n}\cdot[\nabla\Psi]_\Sigma \, \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) - \right.$$

$$\left. \left. - [\Psi]_\Sigma \cdot \sum_{i=1}^{3} \left(x^i - x_0^i\right)^{-1} \cdot \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) \right\} d^3x \right\} = 0,$$

adică de fapt

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

$$\int_{\Sigma}\left\{\left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial n}\right]_{\Sigma}\Psi-\Psi^*\left[\frac{\partial\Psi}{\partial n}\right]_{\Sigma}\right\}d\Sigma -$$

(4.24)

$$-\lim_{VolD\to 0}\int_{D}\left\{[\Psi^*]_{\Sigma}\Psi-\Psi^*[\Psi]_{\Sigma}\right\}\sum_{i=1}^{3}\left(x^i-x_0^i\right)^{-1}\delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma)d^3x=0,$$

deoarece

$$\lim_{VolD\to 0}\int\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)d^3x = 0 \quad si \quad \lim_{VolD\to 0}\int\left\{(\Delta\Psi^*)\Psi-\Psi^*(\Delta\Psi)\right\}d^3x = 0. \tag{4.25}$$

După cum se observă, ecuaţia (4.24) este identic satisfăcută pe suprafaţa Σ dacă şi numai dacă sunt îndeplinite condiţiile "de trecere"

$$\text{a)} \quad [\Psi]_{\Sigma}=\Psi(\Sigma_+,t)-\Psi(\Sigma_-,t)\equiv 0 \leftrightarrow \Psi(\Sigma_-,t)=\Psi(\Sigma,t)=\Psi(\Sigma_+,t)$$

$$\text{b)} \quad [\Psi^*]_{\Sigma}=\Psi^*(\Sigma_+,t)-\Psi^*(\Sigma_-,t)\equiv 0 \leftrightarrow \Psi^*(\Sigma_-,t)=\Psi^*(\Sigma,t)=\Psi^*(\Sigma_+,t) \tag{4.26}$$

$$\text{c)} \quad \left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial n}\right]_{\Sigma}\Psi(\Sigma,t)-\Psi^*(\Sigma,t)\left[\frac{\partial\Psi}{\partial n}\right]_{\Sigma}\equiv 0 \; ; \; \frac{\partial\Psi^*}{\partial n}=\vec{n}\cdot\nabla\Psi^* \; , \; \frac{\partial\Psi}{\partial n}=\vec{n}\cdot\nabla\Psi$$

(Σ_- şi Σ_+ sunt respectiv faţa interioară şi faţa exterioară a suprafeţei Σ), care evidenţiază în mod clar atât continuitatea spaţială a funcţiei de undă cât şi continuitatea componentei normale

$$j_n=\frac{i\hbar}{2m_0}\left\{\frac{\partial\Psi^*}{\partial n}\Psi-\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial n}\right\}_{\Sigma} \tag{4.27}$$

a densităţii curentului de probabilitate la trecerea prin suprafaţa Σ. Legat de această ultimă condiţie a continuităţii (4.26.c) a componentei normale (4.27) a curentului de probabilitate, să efectuăm, prin utilizarea directă a ecuaţiei Schrödinger (1.18), o analiză mai detaliată a situaţiilor în care pot apărea salturi ale derivatei funcţiei de undă în direcţia normalei la suprafaţa Σ şi să demonstrăm concret că acestea păstrează valabilitatea condiţiei de continuitate (4.26.c). In baza relaţiei (4.26.a), de continuitate a funcţiei de undă în punctele suprafeţei Σ

BUCHAREST UNIVERSITY LIBRARY

expresia (4.16.b) devine

(4.28) $\Delta\Psi = \underline{\Delta\Psi} + \vec{n}\cdot[\nabla\Psi]_\Sigma \cdot \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma)$,

astfel încât ecuaţia Schrödinger temporală capătă forma

(4.29) $\underline{\Delta\Psi} + i\frac{2m_0}{\hbar}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \vec{n}\cdot[\nabla\Psi]_\Sigma\ \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma) = \frac{2m_0}{\hbar^2}V(\vec{x},t)\Psi$,

în care am luat în considerare relaţia (4.21) provenită din continuitatea funcţiei de undă în raport cu variabila temporală $t\in[0,\infty)$. Integrând pe domeniul infinitezimal D (în care este inclusă suprafaţa Σ) ambii membri ai ecuaţiei (4.29), obţinem ecuaţia

(4.30) $\int_D \left\{\underline{\Delta\Psi} + i\frac{2m_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\}d^3x + \int_\Sigma \left[\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right]_\Sigma d\Sigma = \frac{2m_0}{\hbar^2}\int_D V(\vec{x},t)\Psi d^3x$

care, în limita $Vol(D)\to 0$, capătă forma

(4.31) $\int_\Sigma \left[\frac{\partial\Psi}{\partial n}\right]_\Sigma d\Sigma = \frac{2m_0}{\hbar^2}\lim_{Vol(D)\to 0}\int_D V(\vec{x},t)\Psi d^3x$

deoarece, din cauza mărginirii şi continuităţii părţilor regulate $\underline{\Delta\Psi}$ şi $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$,

(4.32) $\lim_{Vol(D)\to 0}\int_D \left\{\underline{\Delta\Psi} + i\frac{2m_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\}d^3x = 0$.

Să presupunem acum că funcţia $V(\vec{x},t)$ a energiei "potenţiale" a particulei este mărginită şi continuă aproape peste tot în $\mathbb{R}^3$ cu excepţia punctelor suprafeţei Σ unde suferă un salt de tip δ, adică

(4.33) $V(\vec{x},t) = \underline{V(\vec{x},t)} + V_0(\Sigma,t)\ \delta(\vec{x}-\vec{x}_0;\Sigma)$.

Având în vedere relaţia (4.33) şi faptul că

(4.34) $$\lim_{Vol(D)\to 0} \int_D \underline{V}(\vec{x},t)\Psi \; d^3x = 0,$$

integrala din membrul drept al ecuaţiei (4.31) devine

(4.35) $$\lim_{Vol(D)\to 0} \int_D V(\vec{x},t)\Psi \; d^3x = \int_\Sigma V_0(\Sigma,t)\Psi(\Sigma,t)d\Sigma$$

şi obţinem ecuaţia

(4.36) $$\int_\Sigma \left\{ \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right]_\Sigma - \frac{2m_0}{\hbar^2} V_0(\Sigma,t)\Psi(\Sigma,t) \right\} d\Sigma = 0,$$

din care rezultă expresia locală a saltului proiecţiei normale a gradientului funcţiei de undă în punctele suprafeţei Σ

(4.37) $$\left[\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right]_\Sigma = \frac{2m_0}{\hbar^2} V_0(\Sigma,t)\Psi(\Sigma,t).$$

Cu ajutorul relaţiei (4.37) şi a conjugatei ei complexe

(4.38) $$\left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial n}\right]_\Sigma = \frac{2m_0}{\hbar^2} V_0(\Sigma,t)\Psi^*(\Sigma,t),$$

putem estima imediat saltul $[j_n]_\Sigma$ al componentei normale a densităţii curentului de probabilitate pe suprafaţa Σ

$$[j_n]_\Sigma = \frac{i\hbar}{2m_0}\left\{ \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial n}\Psi - \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right)_{\Sigma_+} - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial n}\Psi - \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right)_{\Sigma_-} \right\} =$$

(4.39) $$= \frac{i\hbar}{2m_0}\left\{ \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial n}\right]_\Sigma \Psi(\Sigma,t) - \Psi^*(\Sigma,t)\left[\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right]_\Sigma \right\} =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m_0}\cdot\frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0(\Sigma,t) - V_0(\Sigma,t))\Psi^*(\Sigma,t)\Psi(\Sigma,t)$$

deci,

BCU IASI - CENTRUL UNIVERSITY LIBRARY

(4.40) $[j_n]_\Sigma \equiv 0$,

adică într-adevăr condiţia de continuitate (4.26.c) a curentului de probabilitate este respectată chiar şi în cazurile cu totul speciale din punct de vedere fizic, când microparticula interacţionează cu câmpuri simplu-potenţiale de tip " δ - superficiale", descrise de relaţia (4.33), iar proiecţia normală a gradientului funcţiei de undă posedă pe suprafaţa Σ un salt de forma (4.37). Ajungem astfel, prin extinderea cadrului ştiinţific al acestei analize, la cea de a treia condiţie pe care trebuie să o îndeplinească soluţia fizică a ecuaţiei Schrödinger:

3) Derivatele parţiale ale funcţiei de undă "la stânga" şi "la dreapta" oricărui punct (x) din $\mathbb{R}^3$ trebuie să fie finite, adică

$$\left\{\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x^i}(x^i-0,t)\right|\right\}_{i=\overline{1,3}} < \infty \text{ şi } \left\{\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x^i}(x^i+0,t)\right|\right\}_{i=\overline{1,3}} < \infty$$

deoarece altfel, densitatea $\vec{j}$ a curentului de probabilitate va fi lipsită de semnificaţie fizică.

Evident, în clasa de condiţii generale impuse funcţiei de undă este cuprinsă şi condiţia de univocitate

4) $$\Psi(r,\ \theta+2k\pi,\ \varphi+2l\pi,\ t) = \Psi(r,\ \theta,\ \varphi,\ t)$$

oricare ar fi $k,l\in Z$ şi $(r,\theta,\varphi,t)\in[0,\infty)x[0,\pi]x[0,2\pi)x\ \mathbb{R}$.

Revenind la ecuaţia (4.31), să presupunem că Σ este o suprafaţă închisă care separă spaţiul $\mathbb{R}^3$ în regiunea interioară D_1 şi cea exterioară $D_2 = \mathbb{R}^3 - \overline{D_1}$, în care potenţialul $V(\vec{x},t)\in C(D_1)\cap C(D_2)$ are valorile $V_1(\vec{x},t)$ şi prezintă pe Σ un salt finit

$$\delta V = V_1(\Sigma_+,t) - V_1(\Sigma_-,t).$$

In aceste condiţii

$$(4.41)\quad \int \left[\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right]_\Sigma d\Sigma = \frac{2m_0}{\hbar^2} \lim_{Vol(D)\to 0} \int_D V(\vec{x},t)\Psi d^3x = 0$$

şi deci

$$(4.42)\quad \left[\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right]_\Sigma = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right)(\Sigma_+,t) - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial n}\right)(\Sigma_-,t) = 0,$$

adică, proiecţia normală a gradientului funcţiei de undă este continuă pe suprafaţa de separaţie Σ. De aici rezultă că,

5) dacă potenţialul $V(\vec{x},t)$ are pe mulţimile de măsură nulă din $\mathbb{R}^3$ discontinuităţi de speţa I, atunci soluţia fizic acceptabilă $\Psi(\vec{x},t)$ a ecuaţiei Schrödinger este de clasă C^1 peste tot în $\mathbb{R}^3$.

Deoarece marea majoritate a configuraţiilor experimentale, de analiză a diverselor proprietăţi cuantice ale unui microsistem, se încadrează exact în termenii condiţiei 5, aceasta joacă un rol deosebit în determinarea univocă, în urma integrării ecuaţiei lui Schrödinger, a funcţiei de stare $\Psi(\vec{x},t)$ a sistemului. De asemenea, în foarte multe aplicaţii se întâlneşte o altă clasă de modele uniparticulă, corespunzătoare unor microsisteme simple, ce pot fi uşor "idealizate", în care potenţialul $V(\vec{x},t)$ este de clasă C^0 peste tot în $\mathbb{R}^3 x\ \mathbb{R}$ şi astfel, problema integrării ecuaţiei Schrödinger (1.18), cu condiţia iniţială

$$(4.43)\quad \Psi(\vec{x},0) = \lim_{t\to 0} \Psi(\vec{x},t) = \psi_0(\vec{x}),$$

cu $\psi_0(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ de clasă $C^2(\mathbb{R}^3)$, se încadrează complet în teoria generală a Problemei Cauchy pentru ecuaţiile de tip normal parabolic cu coeficienţi complexi, din care deducem că soluţia $\Psi(\vec{x},t)$ există, este

unică şi în plus, [66]

6) este de clasă $C^2(\mathbb{R}^3) \cap C^1(0,\infty) \cap C^0[0,\infty)$ în "spaţiu-timpul" $\mathbb{R}^3 x \mathbb{R}$.

In fine, pentru sistemele uniparticulă scalare, nerelativiste şi conservative, deci $V(\vec{x},t) = V(\vec{x})$: $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, ecuaţia Schrödinger (1.18) se reduce la ecuaţia atemporală (1.12), pentru funcţia de amplitudine $\psi(\vec{x};E)$ corespunzătoare stării cuantice staţionare de energie totală E, care transcrisă sub forma

$$(4.44)\quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x};E) = E\psi(\vec{x};E),$$

reprezintă o problemă "clasică" de determinare a funcţiilor şi valorilor proprii ale operatorului liniar

$$(4.45)\quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{x}).$$

Cu astfel de probleme ne vom ocupa într-un context mai general, bazat pe formalismul matematic al Mecanicii Cuantice, în capitolele ce urmează.

In încheierea acestui paragraf să discutăm puţin şi cazurile în care avem de a face cu potenţiale conservative $V(\vec{x})$ ce satisfac anumite condiţii de periodicitate (spaţială). In astfel de situaţii este natural să cerem ca densitatea de probabilitate $|\Psi(\vec{x},t)|^2$ să posede acelaşi tip de periodicitate spaţială deoarece, la orice moment t fixat, configuraţia fizică dintr-un punct oarecare, de coordonate (x^1,x^2,x^3), va fi identică în toate punctele din $\mathbb{R}^3$ "periodic conectate" între ele, adică având coordonatele $(x^1+n_1a^1,\ x^2+n_2a^2,\ x_3+n_3a^3)$ cu $n_1,\ n_2,\ n_3 \in Z$. De exemplu, în cazul unidimensional $V(x)$: $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, dacă avem

(4.46) $V(x+na) = V(x)$, $(\forall)\ n\in Z$,

atunci vom impune pătratului modulului funcţiei de amplitudine condiţia de periodicitate

(4.47) $|\psi(x+na)|^2 = |\psi(x)|^2$, $(\forall)\ n\in Z$

din care rezultă aşa numita "condiţie Bloch pentru funcţia de amplitudine"

(4.48) $\psi(x+na) = e^{i\chi na}\cdot\psi(x)$, $(\forall)\ n\in Z$, $\chi\in\mathbb{R}$,

iar mărimea $\hbar\chi$ este cunoscută în literatura de specialitate sub denumirea de "quasiimpuls". Notând cu $\psi_\chi(x)$ funcţia de amplitudine a unei microparticule de quasiimpuls $\hbar\chi$ şi energie potenţială spaţial-periodică de tip (4.46), putem introduce vestitele "funcţii Bloch de modulaţie" $u_\chi(x)$, definite prin relaţia

(4.49) $\psi_\chi(x) = e^{i\chi x}\cdot u_\chi(x)$

care se bucură, după cum se verifică imediat înlocuind (4.49) în (4.48), de aceeaşi proprietate de periodicitate ca şi energia potenţială $V(x)$, adică

(4.50) $u_\chi(x+na) = u_\chi(x)$, $(\forall)\ n\in Z$

şi aduc ecuaţia Schrödinger atemporală la forma "ecuaţiei Bloch-Schrödinger"

(4.51) $$\frac{d^2u_\chi}{dx^2} + 2i\chi\frac{du_\chi}{dx} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E(\chi)-\frac{\hbar^2}{2m_0}\chi^2-V(\chi)\right]u_\chi = 0,$$

obţinută prin utilizarea în ecuaţia (1.12) (în cazul unidimensional) a relaţiei de definiţie (4.49). In ce priveşte integrarea ecuaţiei (4.51), este suficient ca aceasta să fie efectuată pe intervalul $[0, a]$, deoarece, datorită proprietăţilor (4.46) şi (4.50), soluţia $u_\chi:[0, a]\to\mathbb{C}$ admite prelungire prin periodicitate pe toate celelalte intervale $[na, (n+1)a]$, $\forall\ n\in Z$, ale axei reale $\mathbb{R}$. Prin generalizarea acestor

rezultate, ((4.46)-(4.51), la cazul unui spaţiu de configuraţie 3-dimensional s-au pus bazele Teoriei Cuantice Moderne a Corpului Solid.

IV.5. Expresia semiclasică a funcţiei de undă. Principiul euristic în ecuaţia lui Schrödinger

La începutul primului paragraf al acestui capitol spuneam că Louis de Broglie, pornind de la analogia dintre mecanica hamiltoniană a punctului material şi optica geometrică, a intuit necesitatea formulării unei teorii consecvente din punct de vedere cuantic, denumită de el "mecanică ondulatorie", care să conţină euristic mecanica clasică, aşa cum optica ondulatorie se reduce în limita lungimilor mici la optica geometrică. In acest paragraf vom stabili mai întâi, prin integrarea ecuaţiei Schrödinger pentru microparticula liberă cu impuls determinat, aşa numita "expresie semiclasică a funcţiei de undă", cu ajutorul căreia vom demonstra apoi, în cazul mai general al microparticulei scalare, nerelativiste, într-un câmp exterior de potenţial simplu, respectarea principiului euristic de către ecuaţia Schrödinger temporală, adică existenţa, în limita $\hbar \to 0$, a compatibilităţii mecanicii ondulatorii cu mecanica clasică.

Fie în spaţiul fizic $\mathbb{R}^3$ o microparticulă liberă, de masă m_0, aflată în mişcare nerelativistă, cu impulsul mecanic $\vec{p}=(p^1, p^2, p^3)$ perfect determinat în raport cu referenţialul cartezian (inerţial) $\{Ox^1x^2x^3\}$. Potenţialul exterior fiind zero, energia particulei este integral de natură cinetică

(5.1) $E = \frac{1}{2m_0}|\vec{p}|^2$

şi are o valoare constantă, stabilită exact de impulsul determinat al particulei. Cu alte cuvinte, din punct de vedere cuantic, microparticula se află într-o stare staţionară, de impuls şi energie cunoscute, caracterizată de unda asociată

(5.2) $\Psi(\vec{x},t) = \psi(\vec{x})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right]$

a cărei funcţie de amplitudine $\psi(\vec{x})$ este soluţia ecuaţiei Schrödinger atemporală, cu $V(\vec{x})\equiv 0$,

(5.3) $\Delta\psi(\vec{x}) + \frac{2m_0}{\hbar^2}E\,\psi(\vec{x}) = 0,$

adică

(5.4) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^{1^2}} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x^{2^2}} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x^{3^2}} + \frac{1}{\hbar^2}\cdot\left[(p^1)^2+(p^2)^2+(p^3)^2\right]\psi = 0.$

Pentru integrarea acestei ecuaţii vom aplica metoda Fouriei de separare a variabilelor, adică vom căuta soluţia $\psi(\vec{x})$ sub forma unui produs de trei funcţii dependente fiecare de câte una din variabilele x^1, x^2, x^3

(5.5) $\psi(\vec{x}) = \psi_1(x^1)\psi_2(x^2)\psi_3(x^3) \quad , \quad \forall\, x^i\in\mathbb{R}\ ,\ i=1,2,3.$

In acest fel, forma particulară (5.4) a ecuaţiei Schrödinger staţionară devine

(5.6) $\psi_2\psi_3\left[\frac{d^2\psi_1}{dx^{1^2}}+\left(\frac{p^1}{\hbar}\right)^2\psi_1\right]+\psi_1\psi_3\left[\frac{d^2\psi_2}{dx^{2^2}}+\left(\frac{p^2}{\hbar}\right)^2\psi_2\right]+\psi_1\psi_2\left[\frac{d^2\psi_3}{dx^{3^2}}+\left(\frac{p^3}{\hbar}\right)^2\psi_3\right]=0$

şi trebuie să fie satisfăcută de sistemul de funcţii $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,3}}$ peste tot în $\mathbb{R}^3$. Deoarece coordonatele $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$ sunt variabile independente, iar

fiecare din soluţiile banale $\{\psi_i(x^i)= 0,\ \forall\ x^i\in\mathbb{R}\}_{i=\overline{1,3}}$ este exclusă ca fizic neinteresantă, rezultă că singura posibilitate ca membrul drept al ecuaţiei (5.6) să se anuleze identic în toate punctele din $\mathbb{R}^3$ este aceea ca fiecare din funcţiile $\left\{\frac{d^2\psi_i}{dx^{i2}}+\left(\frac{p^i}{\hbar}\right)^2\psi_i\right\}_{i=\overline{1,3}}$ să se anuleze identic pe subspaţiul real $\mathbb{R}$ corespunzător, ceea ce reduce problema determinării soluţiei de forma (5.5) a ecuaţiei cu derivate parţiale (5.4), la problema integrării sistemului de ecuaţii diferenţiale ordinare, de ordinul II, liniare şi omogene

(5.7) $\frac{d^2\psi_i}{dx^{i2}}+k_i^2\psi_i= 0$, $cu\ k_i=\frac{p_i}{\hbar}$, $p_i=p^i$, i=1,2,3 (fără sumare după i).

Ecuaţia "generică"

(5.8) $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$

a sistemului (5.7) are soluţia generală

(5.9) $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $cu\ A,B\in\mathbb{C}$,

în care, pentru $k>0$, termenul în e^{ikx} exprimă propagarea în sensul pozitiv al axei $0x$, iar termenul în e^{-ikx} corespunde propagării în sens invers, spre $x=-\infty$. Considerând că am orientat axele referenţialului cartezian astfel încât componentele $(p^i=p_i)_{i=\overline{1,3}}$ ale impulsului sunt toate pozitive, rezultă că în fiecare subspaţiu $\{x^i \mid x^i\in\mathbb{R}\}$ termenul $A\exp\left[\frac{i}{\hbar}px\right]$ reprezintă unda asociată care se propagă în sensul impulsului particulei. Cum câmpul exterior lipseşte, particula nu va întâlni în spaţiu regiuni de potenţial nenul pe ale căror frontiere să se producă reflexia undei

asociate şi, astfel, toate amplitudinile $\{B_i\}_{i=\overline{1,3}}$ trebuie să fie zero. In aceste condiţii, soluţia cu sens fizic a ecuaţiei generice (5.8) are expresia

(5.10) $\psi(x) = A\exp(ikx)$,

adică funcţiile $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,3}}$, soluţii ale sistemului (5.7), sunt toate de forma

(5.11) $\psi_i(x^i) = A_i \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_i x^i\right)$, $i=1,2,3$ (fără sumare).

Din (5.11), (5.5) şi (5.1) obţinem pentru funcţia de undă a microparticulei libere, cu impulsul determinat $\vec{p}$, expresia

(5.12) $\Psi(\vec{x},t) = \psi_0 \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\vec{p}\vec{x} - \frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}t\right]\right\}$, $\psi_0 \in \mathbb{C}$,

în care am notat cu ψ_0 produsul celor trei amplitudini $\{A_i\}$.

Comparând "termenul de fază"

(5.13) $\Phi(\vec{x},t) = \vec{p}\vec{x} - \frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\cdot t$,

prezent în soluţia (5.12), cu expresia (I.6.12.a) a integralei complete $S(\vec{x},t)$, a ecuaţiei Hamilton-Jacobi pentru particula liberă, observăm o identitate remarcabilă, în baza căreia soluţia (5.12) a ecuaţiei Schrödinger pentru microparticula liberă capătă forma

(5.14) $\Psi(\vec{x},t) = \psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\vec{x},t)\right]$,

numită "expresia semiclasică a funcţiei de undă" [41, 61].

Sub aspect cantitativ exact, adică cu Ψ soluţie a ecuaţiei Schrödinger şi S soluţie a ecuaţiei Hamilton-Jacobi (pentru acelaşi sistem fizic), relaţia (5.14) este valabilă numai în cazul particulei libere sau a sistemelor de particule libere (când $\vec{x}$ va reprezenta vectorul de poziţie al punctului figurativ în spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^{3N}$, cu $N=$

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

numărul de particule), dar sub aspect calitativ, principial, expresia semiclasică a funcţiei de undă are un caracter de foarte înaltă generalitate. Ea stabileşte prin intermediul constantei lui Planck, o legătură profundă între două mărimi fundamentale în întreaga Fizică, la orice scară a dimensiunilor spaţio-temporale: funcţionala universală a acţiunii şi funcţia de stare cuantică a oricărui sistem fizic.

Pentru a înţelege corect sensul acestei afirmaţii, care prin natura sa este foarte importantă, să nu uităm sublinierea pe care am făcut-o:

> expresia semiclasică a funcţiei de undă are într-adevăr un caracter general dar de ordin calitativ şi nu cantitativ, de valabilitate riguroasă.

Faptul că în formula (5.14) funcţia $S(\vec{x},t)$, de la argumentul exponenţialei, reprezintă chiar acţiunea fizică este o consecinţă a caracterului particular al sistemului considerat, adică a proprietăţii particulei de a fi liberă, şi putem să ne convingem de acest lucru nu numai prin compararea formulelor (5.13) şi (I.4.12.a), ci şi prin parcurgerea efectivă a drumului invers, de la relaţia (5.14), prin ecuaţia Schrödinger (1.18) cu $V(\vec{x},t)\equiv 0$, către ecuaţia Hamilton-Jacobi. Să luăm deci funcţia de undă a microparticulei libere de forma (5.14) şi să considerăm pentru moment că $S(\vec{x},t)$ este o funcţie necunoscută atât ca expresie cât şi ca semnificaţie. Inlocuind (5.14), în ecuaţia (1.18) cu $V\equiv 0$, obţinem ecuaţia

$$(5.15)\quad \Delta\left[e^{\frac{i}{\hbar}S}\right] = -\,i\frac{2m_0}{\hbar}\,e^{\frac{i}{\hbar}S}\cdot\frac{\partial S}{\partial t}$$

care, prin explicitarea membrului stâng şi simplificarea exponenţialei, devine

$$(5.16)\quad -\frac{i}{\hbar^2}|\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar}\Delta S = \frac{2m_0}{\hbar^2}\frac{\partial S}{\partial t},$$

adică ia forma

$$(5.17)\quad \frac{1}{2m_0}|\nabla S|^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m_0}\Delta S.$$

Pentru ca soluţia acestei ecuaţii să posede o semnificaţie fizică directă, ea trebuie să fie o funcţie cu valori reale, ceea ce implică, prin prezenţa în membrul drept a unităţii imaginare i, condiţia ca ea să satisfacă "simultan" următoarele două ecuaţii cu derivate parţiale:

$$(5.18)\quad \text{a)}\quad \frac{1}{2m_0}|\nabla S|^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

$$\text{b)}\quad \Delta S = 0.$$

Din punct de vedere clasic, este evident că ecuaţia (5.18.a) reprezintă chiar ecuaţia Hamilton-Jacobi (I.6.4) pentru particula liberă, iar soluţia $S(\vec{x},t)$ dată de expresia (I.6.12.a), are semnificaţia acţiunii, dar rolul şi necesitatea celei de a doua ecuaţii din sistemul (5.18) nu sunt deloc evidente, căci în cadrul fizicii clasice, prin aplicarea teoremei lui Jacobi, mişcarea unui punct material, sau a unui sistem cu un număr finit de grade de libertare, este perfect determinată deîndată ce se cunoaşte acţiunea S ca soluţie a unei singure ecuaţii, ecuaţia Hamilton-Jacobi. Faptul că acţiunea (I.6.12.a) satisface identic ecuaţia (5.18.b) nu elimină fondul problemei deoarece, de exemplu în cazul destul de simplu al unui punct material cu un singur grad de libertate şi cu energia potenţială $V(x)$, acţiunea redusă

$$W(x) = \pm\int_{x_0}^{x} [2m_0(E-V(x))]^{1/2}\cdot dx$$

nu mai verifică ecuaţia suplimentară (5.18.b),

$$\frac{d^2W}{dx^2} = 0.$$

Prin urmare, pentru a stabili mai clar legătura dintre funcţia S din relaţia (5.14) şi acţiunea sistemului, trebuie să analizăm expresia semiclasică a funcţiei de undă într-un caz mai general decât cel corespunzător microparticulei libere. Această analiză va evidenţia şi modul în care ecuaţia Schrödinger temporală (1.18) respectă principiul euristic, adică ne va oferi o măsură concretă (cantitativă) a gradului în care mecanica clasică aproximează mecanica ondulatorie. Prin înlocuirea expresiei semiclasice a funcţiei de undă în ecuaţia Schrödinger, aceasta capătă forma

$$(5.19)\quad \frac{1}{2m_0}|\nabla S|^2 + V(\vec{x},t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m_0}\Delta S$$

şi în baza aspectelor semnalate anterior, nu are sens să căutăm soluţia ei în clasa funcţiilor cu valori reale, deoarece în acest caz, când este prezent potanţialul simplu $V(\vec{x},t)$, ecuaţia (5.18.b) nu mai este verificată. Deci, soluţia S a ecuaţiei (5.19) este obligatoriu o funcţie complexă de variabile reale. Să mai notăm că, din punct de vedere fizic, ecuaţiile (5.19) şi (1.18) sunt complet echivalente dar, din punct de vedere matematic, ecuaţia (5.19) este quasi-liniară în timp ce ecuaţia Schrödinger este eminamente liniară. Din acest motiv, integrarea exactă a ecuaţiei Schrödinger dată sub forma (5.19), este cu mult mai dificilă decât în cazul când este dată sub forma (1.18). In schimb, dacă se pune problema unei metode analitice, bazată pe un algoritm simplu şi general (în raport cu potenţialul V) de integrare aproximativă a ecuaţiei Schrödinger, atunci reprezentarea ei sub forma (5.19) este deosebit de utilă, având o serie de avantaje incontestabile. Ideea metodei constă în exprimarea funcţiei S printr-o dezvoltare în serie după puterile constantei lui Planck, adică

$$(5.20)\quad S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \cdot S_2 + \ldots\ ,\ S_i:\ \mathbb{R}^3 x \mathbb{R} \to \mathbb{C}\ ,\ \forall\ i=0,1,2,\ldots$$

şi gruparea, după înlocuirea formei (5.20) în ecuaţia (5.19), a tuturor

termenilor care conţin aceeaşi putere a constantei lui Planck. O dată fixat ordinul aproximaţiei, de exemplu 2 în cazul formulei (5.20), toţi termenii în $\hbar^n$ cu $n>2$ vor fi neglijaţi, iar restul termenilor, grupaţi după puterile lui $\hbar$ până la cea egală cu ordinul aproximaţiei, vor conduce la un sistem recurent de ecuaţii cu derivate parţiale, având drept funcţii necunoscute mărimile $\{S_i(\vec{x},t)\}_{i=0,\ ord.aprox.}$. Pentru a surprinde într-o descriere mai precisă avantajul de ordin tehnic al metodei, să înlocuim în ecuaţia (5.19) formula (5.20):

$$\frac{1}{2m_0}\left(\nabla S_0 - i\hbar\nabla S_1 - \hbar^2\nabla S_2\right)^2 + V(\vec{x},t) + \frac{\partial S_0}{\partial t} - i\hbar\frac{\partial S_1}{\partial t} - \hbar^2\frac{\partial S_1}{\partial t} = \tag{5.21}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m_0}\left[\Delta S_0 - i\hbar\Delta S_1 - \hbar^2\Delta S_2\right].$$

Neglijând toţi termenii cu $\hbar$ la o putere mai mare decât 2, ecuaţia (5.21) devine

$$\left\{\frac{1}{2m_0}|\nabla S_0|^2 + V(\vec{x},t) + \frac{\partial S_0}{\partial t}\right\} - i\hbar\left\{\frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{1}{m_0}\nabla S_0\cdot\nabla S_1 + \frac{1}{2m_0}\Delta S_0\right\} - \tag{5.22}$$

$$- \hbar^2\left\{\frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{m_0}\nabla S_0\cdot\nabla S_2 + \frac{1}{2m_0}\left[\Delta S_1 + (\nabla S_1)^2\right]\right\} = 0,$$

rezultând astfel sistemul recurent al "aproximaţiei de ordin II":

$$\text{a)}\quad \frac{1}{2m_0}|\nabla S_0|^2 + V(\vec{x},t) + \frac{\partial S_0}{\partial t} = 0, \qquad \text{(termenii în } \hbar^0)$$

$$\text{b)}\quad \frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{1}{m_0}\nabla S_0\cdot\nabla S_1 = -\frac{1}{2m_0}\Delta S_0, \qquad \text{(termenii în } \hbar) \tag{5.23}$$

$$\text{c)}\quad \frac{\partial S_2}{\partial t} + \frac{1}{2m_0}\nabla S_0\cdot\nabla S_2 = -\frac{1}{2m_0}\left[\Delta S_1 + |\nabla S_1|^2\right].$$

(termenii în $\hbar^2$)

Avantajul metodei este acum evident: cu excepţia primei ecuaţii,

celelalte două sunt ecuaţii cu derivate parţiale de ordinul I, liniare şi neomogene a căror integrare este mai uşoară, cel puţin în principiu, decât integrarea ecuaţiei Schrödinger (1.18). Fără a mai intra în alte amănunte legate de obţinerea soluţiilor sistemului (5.23), ele depăşind subiectul paragrafului de faţă, să amintim totuşi că Wentzel, Kramers şi Brillouin au fost primii care au sesizat importanţa şi puterea aplicativă a acestei metode şi au reuşit, în cazul sistemelor fizice cu un potenţial conservativ dependent doar de o singură coordonată generalizată, să o aducă la un rafinament deosebit, elaborând una din cele mai utilizate metode de aproximare a soluţiilor ecuaţiei Schrödinger, denumită în onoarea lor "metoda WKB" [41, 61].

Revenind la problema modului în care mecanica clasică este o aproximaţie a mecanicii ondulatorii, să lăsăm la o parte ecuaţia (5.23.c) şi să ne concentrăm asupra ecuaţiilor (5.23.a,b). Prima dintre ele este sigur ecuaţia Hamilton-Jacobi (pentru sistemul considerat), deci funcţia $S_0(\vec{x},t)$ reprezintă indubitabil acţiunea microparticulei în câmpul simplu potenţial $V(\vec{x},t)$. Aşa cum era de aşteptat, datorită valabilităţii generale a principiului euristic, mecanica ondulatorie conţine drept caz limită mecanica clasică cel puţin în cadrul aproximaţiei de ordin zero, când $\hbar^n$ cu $n \geq 1$ se neglijează complet, şi cel mult în cadrul aproximaţiei de ordinul I când constanta lui Planck se ia în considerare, dar se neglijează toate puterile mai mari ale ei. Am făcut această precizare, destul de precaută, deoarece deocamdată nu am lămurit semnificaţia funcţiei $S_1(\vec{x},t)$ şi a ecuaţiei pe care o satisface (5.23.b). Inlocuind funcţia S dată de (5.20), în expresia semiclasică a funcţiei de undă, aceasta ia forma

$$\Psi(\vec{x},t) = \psi_0 e^{S_1(\vec{x},t)} \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x},t) - i\hbar S_2(\vec{x},t)\right], \tag{5.24}$$

al cărei "modul pătrat" devine simplu

$$\rho(\vec{x},t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2 = \exp\left[2S_1(\vec{x},t)\right], \tag{5.25}$$

unde am calibrat la unitate constanta neesenţială ψ_0. Din (5.25) rezultă imediat semnificaţia fizică a funcţiei $S_1(\vec{x},t)$:

ea reprezintă logaritmul natural al rădăcinii pătrate din densitatea de probabilitate asociată microparticulei.

Cum am văzut din (5.23.a) că $S_0(\vec{x},t)$ reprezintă acţiunea fizică, deducem că, la nivelul unei descrieri semiclasice, câmpul $S_2(\vec{x},t)$ şi toate celelalte de ordin superior, S_3, S_4 etc., rămân fără semnificaţie. Asta nu înseamnă că sunt lipsite de importanţă, ci din contra, ele exprimă sub aspect fizic corecţiile de natură eminamente cuantică ce trebuie aduse expresiei semiclasice a funcţiei de undă. Să lămurim acum, prin intermediul formulei (5.25), şi sensul ecuaţiei (5.23.b). Din (5.25) obţinem

$$S_1 = \frac{1}{2}\ln\rho$$

şi (5.23.b) capătă forma

$$\frac{1}{\rho}\left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\nabla S_0}{m_0}\cdot\nabla\rho\right] + \frac{1}{m_0}\nabla\cdot\left[\nabla S_0\right] = 0,$$

adică

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\left[\rho\frac{\nabla S_0}{m_0}\right] = 0. \tag{5.26}$$

Dar în primul capitol am demonstrat că gradientul acţiunii este egal cu impulsul canonic al sistemului iar acesta fiind "simplu-potenţial" conduce la egalitatea impulsului canonic cu impulsul mecanic $\vec{p}=m_0\vec{v}$ (suntem în cazul nerelativist) şi prin urmare

$$\nabla S_0 = m_0\vec{v}, \tag{5.27}$$

unde $\vec{v}$ este viteza clasică a particulei. Sublinierea este importantă

deoarece, să nu uităm, în mecanica cuantică viteza îşi pierde sensul precis, strict determinist, de care se bucură în mecanica clasică. Cu (5.27), ecuaţia (5.26) devine

$$(5.28)\quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\vec{v}) = 0,$$

ea reprezentând în aproximaţia semiclasică ecuaţia de continuitate a curentului de probabilitate. Spre deosebire de "omonima ei cuantică", dedusă în paragraful IV.3 (adică formula (3.13)), ecuaţia (5.28) posedă o valabilitate limitată, evidenţiată de faptul că, în acord cu ea, densitatea de probabilitate se propagă în spaţiu solidar cu particula, urmând legile mecanicii clasice.

In încheierea acestui paragraf, să revenim puţin, dar în mod cu totul necesar, la forma echivalentă (5.19) a ecuaţiei Schrödinger, pentru a stabili cantitativ, printr-o formulă simplă, condiţia de valabilitate a aproximaţiei semiclasice [61]. Dat fiind că în această aproximaţie constanta lui Planck (la puterea întâi) nu se neglijează, nu este permis ca în (5.19) să se ia "ab initio" $\hbar=0$. Rezultă atunci, că ecuaţia (5.19) se va reduce la ecuaţia Hamilton-Jacobi cu atât mai precis cu cât "energia cuanto-mecanică" $\frac{\hbar}{2m_0}\cdot\Delta S$ a particulei are o contribuţie tot mai redusă faţă de energia cinetică $\frac{1}{2m_0}|\nabla S|^2$, ceea ce conduce la inegalitatea

$$(5.29)\quad \hbar|\Delta S| < |\nabla S|^2,$$

ca expresie generală a condiţiei de valabilitate a aproximaţiei semiclasice. Sensul fizic al condiţiei (5.29) se obţine imediat prin utilizarea ecuaţiilor

$$(5.30)\quad \nabla S = \vec{p}\ ,\quad |\vec{p}| = \left[2m_0(E-V(\vec{x}))\right]^{1/2},$$

care aduc relaţia (5.29) la forma

(5.31) $\frac{m_0\hbar}{|\vec{p}|^3}\cdot|\nabla V| < 1.$

Din (5.31) rezultă clar că aproximaţia semiclasică devine inoperantă în cazul microparticulelor de impuls foarte mic, a căror lungime de undă de Broglie, ne mai respectând condiţia

(5.32) $\lambda^3 < \frac{\hbar^2}{m_0}|\nabla V|^{-1},$

devine expresia elocventă a caracterului omdulatoriu.

IV.6. Ecuaţia de Evoluţie şi Principiul de Corespondenţă

Se spune adesea că Fizica Teoretică este o disciplină al cărei formalism matematic îi face uneori pe matematicieni să zâmbească, dar mai apoi, experimental, rezultatele sunt atât de bine verificate, încât îi fac să se îngrozească. Probabil la fel se va întâmpla şi în cazul paragrafului de faţă în care, printr-o generalizare "ad hoc" a unora dintre rezultatele fundamentale ale Mecanicii Analitice, va fi justificată "ecuaţia de evoluţie a stărilor cuantice" şi va fi formulat "principiul corespondenţei" ca regulă de cuantificare.

Expresia semiclasică a funcţiei de undă (5.14) am obţinut-o în paragraful anterior prin compararea termenului de fază (5.13) al soluţiei ecuaţiei Schrödinger staţionare, pentru particula liberă de impuls determinat, cu funcţia principală a lui Hamilton $S(\vec{x},t)$ de forma (I.6.12.a), soluţie a ecuaţiei Hamilton-Jacobi (I.6.4) pentru acelaşi sistem fizic. Am presupus apoi că relaţia (5.14), din punct de vedere semicantitativ, are o valabilitate mai generală decât cea corespunzătoare sistemului pentru care a fost dedusă şi am testat concret cât de departe "merge" această valabilitate în cazul unui sistem cuantic uniparticulă,

cu potenţial simplu, descris în evoluţia sa de ecuaţia Schrödinger temporală (1.18).

In vederea justificării Ecuaţiei de Evoluţie, ca ecuaţie fundamentală a Mecanicii Cuantice, şi care cuprinde ecuaţiile Schrödinger (1.12), (1.18) drept cazuri particulare, să demonstrăm mai întâi că, sub aspect semiclasic, termenul de fază al undei de Broglie-Schrödinger coincide cu acţiunea fizică a oricărui sistem natural cu un număr finit f de grade de libertare. Vom porni de la observaţia că termenul de fază al undei de Broglie asociate microparticulei libere are în mod exact expresia (5.13), deoarece impulsul şi energia particulei sunt constante în orice moment t şi în orice punct $(x^i)_{i=\overline{1,3}}$ al spaţiului $\mathbb{R}^3$. In general însă, în situaţia în care particula este supusă acţiunii unui câmp exterior (de exemplu de potenţial generalizat $U(x, \dot{x}, t)$), impulsul şi energia acesteia nu mai rămân constante în decursul mişcării. Ca urmare, între două evenimente $(x^i,t)_{i=\overline{1,3}}$ şi $(x^i+dx^i,\ t+dt)_{i=\overline{1,3}}$ infinitezimal "apropiate" din spaţiu-timpul $\mathbb{R}^3 x \mathbb{R}$, termenul de fază al undei asociate particulei va suferi variaţia infinitezimală

(6.1) $d\Phi(\vec{x},t) = \vec{p} \cdot d\vec{x} - E\, dt = p_i dx^i - E\, dt$.

Această expresie poate fi imediat generalizată la cazul unui sistem fizic natural cu f grade de libertate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ (privite drept coordonate generalizate), caracterizat de funcţia Lagrange $L(x;\dot{x};t)$, înlocuind componentele $\{p_i\}_{i=\overline{1,f}}$ ale impulsului mecanic cu impulsurile canonice

$$p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\ ,\quad a=\overline{1,f},$$

conjugate variabilelor $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi energia E cu funcţia lui Hamilton $H(x;p;t)$, adică

(6.2) $d\Phi(x^a,t) = p_a dx^a - H\,dt$.

Pentru a da un sens fizic mai clar expresiei (6.2), să considerăm $\gamma(t)$; $I\subset\mathbb{R}\to\mathbb{R}^f$, dată prin $\{x^a(t)=\gamma(t)\}_{a=\overline{1,3}}$, una din traiectoriile posibile ale sistemului. In lungul acestei traiectorii este valabilă relaţia

(6.3) $dx^a = \dfrac{dx^a}{dt}dt = \dot{x}^a\,dt$, $\forall\, t\in I$ şi $\gamma\in C^1(I)$

astfel încât, variaţia termenului de fază (6.2) între momentele t şi $t+dt$ de-a lungul traiectoriei posibile $\gamma(t)$ are expresia

(6.4) $d\Phi(x^a,t) = \left[p_a\dot{x}^a - H(x;p;t)\right]dt$ cu $p_a = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}$, $a=\overline{1,f}$.

Utilizând în (6.4) relaţia de definiţie (I.3.11) a funcţiei lui Hamilton

$$H\left(x^a;p_a;t\right) = p_a\dot{x}^a - L\left(x^a;\dot{x}^a;t\right) \quad , \quad a=\overline{1,f},$$

obţinem ecuaţia

(6.5) $\dfrac{d}{dt}\Phi(x^a(t),t) = L(x^a(t);\dot{x}^a(t);t)$,

a cărei soluţie, evaluată prin integrarea între momentul iniţial $t_0\in I\subset\mathbb{R}$ şi momentul curent $t\in I\subset\mathbb{R}$, în lungul traiectoriei $\gamma(t)$, are expresia

$$\Phi(x^a(t),t) = \int_{t_0}^{t} L(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)\,d\sigma$$

şi reprezintă evident integrala acţiunii pe arcul de curbă $\gamma(\sigma)$: $[t_0,t]\subset I\to\mathbb{R}^f$ care uneşte punctul iniţial $\{x^a(t_0)\}_{a=\overline{1,f}} = \gamma(t_0)$ cu punctul curent $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,3}} = \gamma(t)$ din $\mathbb{R}^f$, adică

(6.6) $\Phi(x^a(t),t) = S(x^a(t),t) = \int_{t_0}^{t} L(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)d\sigma$.

BCUAS CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cum $\Phi(x,t)$ din (6.6) este un termen de fază, rezultă, în aproximaţia ψ_0=*constant*, valoarea câmpului undei de Broglie asociate sistemului natural (cu f grade de libertate) în punctul curent $(x^a(t))_{a=\overline{1,3}}$ al curbei γ din spaţiul $\mathbb{R}^f$ de configuraţie, anume

$$\Psi(x^a(t),t) = \psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x^a(t),t)\right] = \tag{6.7}$$
$$= \psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)d\sigma\right].$$

Derivând total în raport cu timpul setul de expresii (6.7) obţinem ecuaţiile

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \dot{x}^a \frac{\partial\Psi}{\partial x^a} = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\partial S}{\partial t}\Psi + \dot{x}^a \frac{\partial S}{\partial x^a}\Psi\right] = \frac{i}{\hbar} L\Psi, \tag{6.8}$$

care, datorită caracterului fizic arbitrar al curbei $\gamma(t)$ în clasa traiectoriilor posibile $\Gamma = \{\gamma(t): J\to D\ ,\ \forall\, J\subset\mathbb{R},\ D\subset\mathbb{R}^f\}$, vor fi valabile în aproximaţia semiclasică în toate punctele curente $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,3}}$ ale curbelor din Γ. Ca urmare, având în vedere şi faptul că acţiunea şi funcţia de undă sunt independente de vitezele generalizate $\{\dot{x}^a\}_{a=\overline{1,f}}$, rezultă din ecuaţiile (6.8), prin derivare parţială în raport cu $\dot{x}^a$, următoarele relaţii deosebit de importante pentru justificarea Ecuaţiei de Evoluţie:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x^c} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x^c}\Psi = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^c}\Psi\ ,\quad c=1,2,...f \tag{6.9}$$

care se pot scrie, sub forma mai sugestivă,

$$p_c\Psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^c}\Psi = \frac{\partial S}{\partial x^c}\Psi = \frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial x^c}\ ,\quad c=1,2,...f \tag{6.10}$$

prin scoaterea în evidenţă a impulsului generalizat p_c conjugat canonic

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

coordonatei generalizate x^c. Cu ajutorul relaţiilor (6.10) cele trei ecuaţii din (6.8) iau formele

$$\text{a)}\quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\partial S}{\partial t}\,\Psi$$

$$\text{(6.11)}\quad \text{b)}\quad \left[\frac{\partial}{\partial t} + \dot{x}^a\frac{\partial}{\partial x^a} - \frac{i}{\hbar}L\right]\Psi = 0$$

$$\text{c)}\quad \left\{\frac{\partial S}{\partial t} + \left[\frac{\partial S}{\partial x^a}\dot{x}^a - L\right]\right\}\Psi = 0,$$

adică

$$\text{a)}\quad -\frac{\partial S}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{(6.12)}\quad \text{b)}\quad \left[\dot{x}^a\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}\right) - L\right]\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\text{c)}\quad \left[\frac{\partial S}{\partial x^a}\dot{x}^a - L\right]\Psi = -\frac{\partial S}{\partial t}\,\Psi.$$

Relaţiile (6.10), împreună cu grupul de ecuaţii (6.12), vor juca, după cum vom vedea imediat, rolul fundamental în metoda descoperită de Erwin Schrödinger în 1926 pentru justificarea ecuaţiei de bază a Macanicii Cuantice şi pentru elaborarea consecventă a formalismului operatorial liniar pe spaţii Hilbert al acestei discipline.

Observaţia cu adevărat remarcabilă, pe care a făcut-o Erwin Schrödinger, constă în faptul că, dacă ieşim din cadrul aproximaţiei semiclasice şi cerem valabilitatea generală, la orice moment t, în orice punct $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ din $\mathbb{R}^f$ şi pentru orice funcţie de undă Ψ, a relaţiilor (6.10) şi (6.12.a), atunci $p_c = \frac{\partial S}{\partial x^c}$ şi $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$ trebuie să aibă expresiile

$$\text{a)} \quad p_c = \frac{\partial S}{\partial x^c} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^c}$$

(6.13)

$$\text{b)} \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}$$

şi cum $\left\{\frac{\partial}{\partial x^c}, \frac{\partial}{\partial t}\right\}_{c=\overline{1,f}}$ sunt operatori (liniari) de derivare pe spaţiul funcţiilor derivabile $D(\mathbb{R}^f x\mathbb{R})$ definite pe $\mathbb{R}^f x\mathbb{R}$, rezultă că aceeaşi proprietate o vor avea şi impulsurile generalizate $\left\{p_c = \frac{\partial S}{\partial x^c}\right\}_{c=\overline{1,f}}$ şi energia $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$ adică expresiile (6.13) constituie relaţiile de definiţie ale operatorilor impuls şi energie în Mecanica Cuantică:

$$\text{a)} \quad \hat{p}_c = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^c}, \quad c=1,2,...f$$

(6.14)

$$\text{b)} \quad \hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t},$$

iar simbolul circomflex îl vom utiliza în mod constant în tratatul de faţă pentru a sublinia caracterul operatorial al mărimilor astfel accentuate.

Deoarece în cadrul aproximaţiei semiclasice, utilizată în obţinerea ecuaţiilor (6.8), ecuaţiile (6.12.b) şi (6.12.c) sunt echivalente, să ne concentrăm asupra ecuaţiei (6.12.c), care reprezintă, din punct de vedere clasic, ecuaţia Hamilton-Jacobi

$$(6.15) \quad H\left(x^a; \frac{\partial S}{\partial x^a}; t\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad a=1,2,...f$$

pentru sistemul natural considerat. In baza observaţiei făcute de Schrödinger, concretizată în relaţiile operatoriale (6.14), rezultă că

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

mărimii clasice $-\frac{\partial S}{\partial t}=E$ îi va corespunde operatorul energie (6.14.b), iar mărimilor clasice $\frac{\partial S}{\partial x^a}=p_a$, $a=\overline{1,f}$, le vor corespunde operatorii impuls (6.14.a), astfel încât, hamiltonianului din (6.15) îi va corespunde operatorul hamiltonian

$$(6.16)\quad \hat{H} = H\left(x^a;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a};t\right)$$

obţinut prin înlocuirea impulsurilor generalizate, din expresia hamiltonianului (clasic), cu expresiile operatoriale corespunzătoare (6.14.a). In urma acestor substituţii generalizatoare, care reprezintă deja forma fundamentală a vestitului Principiu de Corespondenţă, ecuaţia (6.15) ia forma "egalităţii operatoriale"

$$\hat{H} = \hat{E}$$

adică

$$(6.17)\quad \hat{H}\left(x^a;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a};t\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t},$$

din care rezultă, prin acţiunea la dreapta a operatorilor din (6.17) asupra unei funcţii Ψ, ecuaţia propusă de Erwin Schrödinger

$$(6.18)\quad \hat{H}\left(x^a;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a};t\right)\Psi(x^a,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x^a,t)\ ,\quad a=\overline{1,f},$$

ca Ecuaţie de Evoluţie a funcţiei de stare $\Psi(x^a,t)$, care descrie stările cuantice ale unui sistem natural (deci care admite "formulare de acţiune") cu un număr finit f de grade de libertate.

Odată justificată această ecuaţie, dorim să menţionăm următoarele:

(i) In Mecanica Cuantică, în studiul proceselor din microcosmos în care nu au loc transformări ale microobiectelor şi este satisfăcută legea de conservare a numărului acestora, valabilitatea ecuaţiei Schrödinger (6.18) este postulată.

(ii) Inspectând forma (6.18) a Ecuaţiei de Evoluţie, observăm că aceasta este exprimată, în ce priveşte variabilele care intervin, numai în raport cu coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi timpul t. O asemenea modalitate de exprimare se numeşte reprezentare de configuraţie şi exact în cadrul acesteia operatorii impuls şi energie au relaţiile de definiţie (6.14), iar operatorii asociaţi coordonatelor generalizate şi timpului se definesc simplu, ca operatori (liniari) multiplicativi, prin relaţiile:

(6.19) $$\hat{x}^a \Psi = x^a \Psi \text{ şi } \hat{t}\Psi = t\Psi \quad , \quad a=\overline{1,f}$$

valabile oricare ar fi Ψ din mulţimea $\mathcal{F}(\mathbb{R}^f x \mathbb{R})$ a funcţiilor definite pe $\mathbb{R}^f x \mathbb{R}$. Din punct de vedere formal, din (6.19) rezultă că în reprezentarea de configuraţie operatorii coordonată şi operatorul temporal coincid ca expresie cu mărimile clasic corespunzătoare, adică

(6.20)
a) $$\hat{x}^a = x^a \quad , \quad a=\overline{1,f}$$

b) $$\hat{t} = t$$

şi din acest motiv, în cadrul acestei reprezentări, nu vom accentua cu circomflex coordonatele şi timpul.

(iii) Din relaţiile de definiţie (6.14) şi (6.20) este evident că operatorii introduşi sunt liniari. Cum operaţiile fundamentale, sumarea, înmulţirea cu scalari şi multiplicarea operatorilor, aplicate operatorilor liniari, conservă liniaritatea, rezultă că operatorul hamiltonian şi Ecuaţia de Evoluţie sunt eminamente

liniare, adică Mecanica Cuantică, prin însăşi bazele ei, respectă principiul de superpoziţie a stărilor cuantice. Deşi proprietatea de liniaritate nu este în sens strict impusă de Natură, să ne amintim totuşi (cap.III) că ea reprezintă una dintre căile cele mai simple de dezvoltare a unui formalism matematic, de complexitate suficient de redusă, care să modeleze proprietăţile ondulatorii ale microobiectelor şi să explice efectele acestor proprietăţi.

(iv) Fiind o ecuaţie diferenţială de ordinul I în raport cu timpul, unicitatea soluţiei ei $\Psi(x^a,t)\in C^1(t>0)\cap C^0(t\geq 0)$ este asigurată de îndată ce este cunoscută funcţia de stare $\Psi(x^a,t)\in C(\mathbb{R}^3)$ la momentul iniţial $t=0$. Dacă, din punct de vedere matematic, această menţiune, reprezentând de fapt formularea problemei Cauchy pentru ecuaţia (6.18), poate părea "de la sine înţeleasă", din punct de vedere fizic (şi filozofic), este deosebit de importantă, deoarece pune în lumină, într-un cadru general, existenţa şi esenţa determinismului cuantic:

Cunoaşterea stării iniţiale a sistemului este suficientă pentru determinarea funcţiei de stare a acestuia la orice moment ulterior t , iar cu cât hamiltonianul asociat sistemului oferă o modelare mai exactă a acestuia, cu atât soluţia Ecuaţiei de Evoluţie va aproxima mai bine starea cuantică reală de la momentul t . Principial, această aproximare poate fi oricât de bună şi deci nu există un indeterminism în evoluţia funcţiei de stare. Indeterminismul care apare se manifestă în timpul procesului de măsurare a unor mărimi fizice, deoarece în acele momente, datorită interacţiunii sistemului cu aparatul de măsură, funcţia de undă suferă un salt imprevizibil, în urma căruia nu vom mai şti cu certitudine ce valori ale mărimilor

măsurate vom obţine, ci vom cunoaşte numai probabilităţile diverselor tranziţii şi probabilităţile de realizare a valorilor respective. Odată încheiată măsurătoarea, avem noile valori înregistrate, cunoaştem noua stare a sistemului şi evoluţia ulterioară a acesteia este din nou guvernată, determinist, de către Ecuaţia de Evoluţie.

Asupra multora dintre aspectele menţionate mai sus vom reveni în detaliu în cadrul capitolelor următoare. Deocamdată, să ne întoarcem la corespondenţele evidenţiate de Erwin Schrödinger şi să notăm că, în esenţă, ele reprezintă asocierea unor operatori liniari mărimilor fizice fundamentale $\{x^a,t;\ p_a,H\}_{a=\overline{1,f}}$ din Mecanica Hamiltoniană. Prin generalizare se conturează ideea de a asocia operatori (construiţi din operatorii fundamentali $\{x^a,\ t,\ \hat{p}_a\}_{a=\overline{1,f}}$) şi celorlalte mărimi cu care operează metoda analitică a teoriei clasice, astfel încât să se obţină un procedeu unitar, cu rol de ghidare în dezvoltarea formalismului operatorial al Mecanicii Ondulatorii, de cuantificare a Mecanicii Hamiltoniene. Acesta este Principiul de Corespondenţă:

Dat fiind un sistem natural cu f grade de libertate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi hamiltonianul $H(x^a;\ p_a;\ t)$, oricărei mărimi fizice specifice acestui sistem $A(x^a,p_a,t)$, definită nemijlocit în raport cu variabilele dinamice $\{x^a,p_a\}_{a=\overline{1,f}}$, i se ataşează în Mecanica Cuantică un operator liniar $\hat{A}(x^a,\hat{p}_a,t)$, definit (aproape direct) prin substituirea, în relaţia de definiţie a mărimii A, a variabilelor dinamice $\{x^a,p_a\}$ cu operatorii

corespunzători $\left\{ \hat{x}^a = x^a \; ; \; \hat{p}_a = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^a} \right\}_{a=\overline{1,f}}$, *ordonaţi astfel încât operatorul rezultant* $\hat{A}$ *să fie hermitic, adică:*

$$\int_{\mathbb{R}^f} \Psi_1^*(x,t) \left[\hat{A}(x,\hat{p},t) \Psi_2(x,t) \right] d^f x = \int_{\mathbb{R}^f} \left[\hat{A}(x,\hat{p},t) \Psi_1(x,t) \right]^* \Psi_2(x,t) d^f x \tag{6.21}$$

oricare ar fi Ψ_1, Ψ_2 *din clasa acelor aplicaţii (pe* $\mathbb{R}^f x \mathbb{R}$*) pentru care integralele din (6.21) există.*

Prin intermediul acestui principiu se obţine o corespondenţă remarcabilă între ecuaţiile satisfăcute de mărimile clasice şi relaţiile dintre operatorii asociaţi lor, care are profunde implicaţii, după cum vom vedea în capitolul V, în însăşi elaborarea metodei Mecanicii Cuantice.

Nu insistăm mai mult asupra unei formulări mai riguroase a Principiului de Corespondenţă, deoarece, pentru moment, avem toate elementele necesare demonstrării funcţionalităţii sale în câteva cazuri particulare, dar de larg interes fizic.

a) *Transpunerea cuantică a parantezei Poisson fundamentale* (x^a, p_b). *Relaţiile de Comutare date de Werner Heisenberg*

După cum se cunoaşte, se numeşte paranteză Poisson a aplicaţiilor $f(x,p,t)$ şi $g(x,p,t)$, de clasă $c^1(\mathbb{R}^f x \mathbb{R})$, expresia

$$(f,g) = \frac{\partial f}{\partial x^c} \cdot \frac{\partial g}{\partial p_c} - \frac{\partial g}{\partial x^c} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_c}, \quad c=\overline{1,f}. \tag{6.22}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dacă luăm în particular

(6.23) $$f = x^a \text{ şi } g = p_b$$

atunci din (6.22) obţinem

(6.24) $$\left(x^a, p_b\right) = \frac{\partial x^a}{\partial x^c}\cdot\frac{\partial p_b}{\partial p_c} - \frac{\partial p_b}{\partial x^c}\cdot\frac{\partial x^a}{\partial p_c} = \delta^a_c\cdot\delta^c_b,$$

adică rezultă paranteza Poisson fundamentală

(6.25) $$\left(x^a, p_b\right) = \delta^a_b \quad , \quad \forall\, a,b = \overline{1,f}.$$

In Mecanica Cuantică, în locul parantezei Poisson $\left(x^a, p_b\right)$, vom calcula operatorul $\left[\hat{x}^a, \hat{p}_b\right]$ definit prin

(6.26) $$\left[\hat{x}^a, \hat{p}_b\right] = \hat{x}^a\cdot\hat{p}_b - \hat{p}_b\cdot\hat{x}^a$$

şi denumit comutatorul operatorilor $\hat{x}^a$, $\hat{p}_b$.

Inlocuind în (6.26) expresiile (6.20.a) şi (6.14.a) ale operatorilor $\hat{x}^a$ şi $\hat{p}_b$ în reprezentarea de configuraţie şi acţionând la dreapta asupra unei funcţii $\psi(x)$, obţinem

$$\left[\hat{x}^a, \hat{p}_b\right]\psi = \left[x^a, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^b}\right]\psi = x^a\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x^b} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^b}(x^a\Psi),$$

adică

(6.27) $$\left[\hat{x}^a, \hat{p}_b\right]\psi = \frac{\hbar}{i}x^a\frac{\partial\psi}{\partial x^b} - \frac{\hbar}{i}x^a\frac{\partial\psi}{\partial x^b} - \frac{\hbar}{i}\delta^a_b\psi = -\frac{\hbar}{i}\delta^a_b\psi,$$

de unde rezultă transpunerea cuantică a parantezei Poisson (6.25)

(6.28) $$\left[\hat{x}^a, \hat{p}_b\right] = i\hbar\,\delta^a_b,$$

cunoscută sub numele de Relaţia de Comutare a lui Heisenberg şi care a stat la baza elaborării de către acesta, în anul 1925, a Mecanicii Matriciale a microsistemelor. Un an mai târziu, în

BCU "ALEXANDRU IOAN CUZA" UNIVERSITY LIBRARY

1926, Erwin Schrödinger va demonstra, în cadrul formalismului operatorial al Mecanicii Ondulatorii, echivalenţa completă a acesteia cu Mecanica Matricială dezvoltată de Werner Heisenberg, punând astfel bazele unei metode unitare de studiu a sistemelor de microobiecte, anume metoda Mecanicii Cuantice. Revenind la relaţiile (6.25) şi (6.28) observăm că le putem include formal într-o singură relaţie:

(6.29) $$\left(x^a,\ p_b\right) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{x}^a,\ \hat{p}_b\right],$$

care exprimă elocvent aplicarea Principiului Corespondenţei în "trecerea" de la paranteza Poisson a două mărimi fizice A, B la comutatorul operatorilor $\hat{A}$, $\hat{B}$ asociaţi acestora

(6.30) $$(A,B) \to -\frac{i}{\hbar}[\hat{A},\ \hat{B}].$$

b) *Particula scalară, nerelativistă*
într-un câmp exterior de potenţial simplu

Postulând valabilitatea Principiului de Corespondenţă, adică în cazul de faţă a relaţiilor de definiţie a operatorilor impuls şi energie (6.14), vom demonstra prin intermediul relaţiei operatoriale (6.17) ecuaţia lui Schrödinger (1.18).

In spaţiul $\mathbb{R}^3$, în coordonatele carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$, lagrangeianul particulei nerelativiste, de masă m_0 şi energie "simplu potenţială" $V(x^i,t)$, are expresia (I.2.32), cu $A_i \equiv 0$ şi $q\forall = V$, adică

(6.31) $$L = \frac{1}{2} m_0 \delta_{ij} \dot{x}^i \dot{x}^j - V(x^i,t),$$

din care deducem impulsurile canonice

(6.32) $$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} = m_0 \delta_{ij} \dot{x}^j$$

şi hamiltonianul asociat particulei

(6.33) $$H = \frac{1}{2m_0} \delta^{ij} p_i p_j + V(x^i,t).$$

Aplicând Principiul Corespondenţei obţinem din (6.33) operatorul hamiltonian

(6.34) $$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \delta^{ij} \hat{p}_i \hat{p}_j + \hat{V}(x^i,t),$$

care în reprezentarea de configuraţie (6.14.a), (6.20) ia forma concretă

(6.35) $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \delta^{ij} \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} + V(x^i,t),$$

adică

(6.36) $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V(\vec{x},t), \text{ cu } \Delta = \delta^{ij} \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j}.$$

Inlocuind operatorul hamiltonian (6.36) în relaţia operatorială (6.17) şi aplicând totul funcţiei de undă $\Psi(\vec{x},t)$ ajungem la ecuaţia

(6.37) $$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \Psi + V(\vec{x},t)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

din care obţinem, prin înmulţirea ambilor membri cu $-\frac{2m_0}{\hbar^2}$, ecuaţia lui Schrödinger (1.18) pentru stările nestaţionare ale microparticulei scalare nerelativiste într-un câmp de potenţial

BCU IASI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

simplu:

$$\Delta\Psi(\vec{x},t) - \frac{2m_0}{\hbar^2} V(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t) = -i\frac{2m_0}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t). \tag{6.38}$$

Deşi simplu, acesta este un foarte bun exemplu "de a urmări la lucru" Principiul de Corespondenţă, precum şi etapele ce trebuiesc parcurse în vederea aplicării sale, şi evidenţiază de asemenea superioritatea, în planul generalităţii, a Ecuaţiei de Evoluţie (6.18) faţă de ecuaţia Schrödinger (1.18). Din acest punct de vedere, exemplul care urmează va fi cu mult mai elocvent.

c) *Ecuaţia Schrödinger temporală pentru particula în câmp electromagnetic*

Fie o microparticulă scalară, nerelativistă, de masă m_0 şi sarcină electrică q, plasată într-un câmp electromagnetic de potenţial vector $\{A_i(\vec{x},t)\}_{i=\overline{1,3}}$ şi potenţial electric $\forall(\vec{x},t)$. Din punct de vedere clasic, lagrangeianul particulei are expresia (I.2.32) care se scrie în coordonate carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$ sub forma

$$L = \frac{1}{2}m_0\delta_{ik}\dot{x}^i\dot{x}^k + qA_i\dot{x}^i - q\forall, \tag{6.39}$$

din care deducem impulsurile canonice

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} = m_0\delta_{ik}\dot{x}^k + qA_i \tag{6.40}$$

şi relaţiile inverse de explicitare a vitezelor $\{\dot{x}^i\}_{i=\overline{1,3}}$ în raport cu acestea

(6.41) $$\dot{x}^i = \frac{1}{m_0}\delta^{ik}[p_k - qA_k] = \frac{1}{m_0}[p^i - qA^i].$$

Să calculăm acum hamiltonianul din (6.39), (6.41) şi relaţia de definiţie (I.3.11). Avem

(6.42) $$H = \frac{1}{m_0}p_i(p^i - qA^i) - \frac{1}{2m_0}(p_i - qA_i)(p^i - qA^i) - \frac{q}{m_0}A_i(p^i - qA^i) + q\forall,$$

adică

(6.43) $$H = \frac{1}{m_0}[p_i - \frac{1}{2}(p_i - qA_i) - qA_i][p^i - qA^i] + q\forall,$$

ceea ce înseamnă în definitiv

(6.44) $$H = \frac{1}{2m_0}\delta^{ik}(p_i - qA_i)(p_k - qA_k) + q\forall.$$

Prin aplicarea Principiului de Corespondenţă, operatorul hamiltonian asociat hamiltonianului (6.44) devine

(6.45) $$\hat{H} = \frac{1}{2m_0}\delta^{ik}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i} - qA_i\right]\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^k} - qA_k\right] + q\forall,$$

iar Ecuaţia de Evoluţie (6.18) ia forma

(6.46) $$\frac{1}{2m_0}\delta^{ik}\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x^k} - qA_k\Psi\right] - qA_i\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x^k} - qA_k\Psi\right]\right\} + q\forall\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t},$$

în care ordinea de acţiune a operatorilor $\frac{\partial}{\partial x}$ şi $A(x,t)$ trebuie strict respectată, deoarece, în baza relaţiilor de comutare (6.28), aceştia nu comută. Din (6.46), utilizând şi condiţia de etalonare formulată de Lorentz

$$\nabla\cdot\vec{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\forall}{\partial t} = 0,$$

rezultă ecuaţia

(6.47) $$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\Psi+i\frac{q\hbar}{m_0}\vec{A}\cdot\nabla\Psi+q\left[\forall-\frac{i\hbar}{2m_0c^2}\frac{\partial\forall}{\partial t}+\frac{q}{2m_0}|\vec{A}|^2\right]\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

care, prin înmulţire în ambii membri cu factorul $-\frac{2m_0}{\hbar^2}$ ia forma ecuaţiei Schrödinger temporale pentru microparticula scalară, nerelativistă în câmp electromagnetic

(6.48) $$\Delta\Psi-2\frac{i}{\hbar}q\vec{A}\cdot\nabla\Psi-\frac{2m_0q}{\hbar^2}\left[\forall-\frac{i\hbar}{2m_0c^2}\frac{\partial\forall}{\partial t}+\frac{q}{2m_0}|\vec{A}|^2\right]\Psi=-\frac{2im_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t}.$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL V

FORMALISMUL MATEMATIC AL MECANICII CUANTICE I:

FORMALISMUL SCHRÖDINGER PE SPATIUL $\mathfrak{L}^2$ AL FUNCTIILOR DE UNDA

"The begining of the era of modern quantum mechanics is marked by the (...) two simultaneous papers of Heisenberg (1925) and Schrödinger (1926). The first of these papers proposes essentially the formalism of matrix mechanics, while the second one proposes the formalism of wave mechanics. It was first indicated by Schrödinger that these two formalisms are physically equivalent. Both can be embraced in a more general formulation (...) which was first proposed in a somewhat heuristic form by Dirac (1930). A mathematically rigorous development of the general formalism of quantum mechanics can be achieved by taking advantage of Hilbert space theory (...). The two classes of basic objects are the states and the observables. In the Schrödinger formulation of quantum mechanics the state is (...) [given by a] (...) function $\Psi(t)$ *[which belongs to] (...) an*

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

infinite-dimensional complex Euclidean space, which bears the name of Hilbert space (...) [and the] observables are represented by so-called self-adjoint operators [acting] in [this] space (...)"

Eduard Prugovečki[1]

In acest capitol vom expune elementele fundamentale şi tehnica de lucru corespunzătoare formalismului mecanicii cuantice în varianta dezvoltată de Erwin Schrödinger în 1926, bazată pe acţiunea operatorilor liniari hermitici, asociaţi mărimilor fizice, pe spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2$ al funcţiilor de undă pătratic integrabile în sens Lebesgue. A doua variantă a formalismului, adică cea bazată pe acţiunea operatorilor (utilizaţi în mecanica cuantică) pe spaţiul liniar abstract al vectorilor de stare, elaborată de Paul Adrien Maurice Dirac în perioada 1927-1930 şi care conferă formalismului Schrödinger, mai ales sub aspect simbolistic, un înalt grad de generalitate, o vom prezenta în detaliu în următorul capitol.

---

[1] *"Începutul erei mecanicii cuantice moderne este marcat de cele două lucrări aproape simultane ale lui Heisenberg (1925) şi Schrödinger (1926). Prima dintre aceste lucrări propune în esenţă formalismul mecanicii matriciale, în timp ce a doua propune formalismul mecanicii ondulatorii. Faptul că aceste două formalisme sunt fizic echivalente a fost indicat pentru prima dată de Schrödinger. Ambele pot fi incluse într-o formulare mai generală, care a fost propusă pentru prima oară, sub o formă oarecum euristică, de către Dirac (1930). O dezvoltare matematic riguroasă a formalismului general al mecanicii cuantice poate fi realizată profitând [de avantajele oferite] de teoria spaţiilor Hilbert. Cele două clase de obiecte fundamentale sunt stările şi observabilele. In formularea Schrödinger a mecanicii cuantice, starea este dată de o funcţie $\Psi(t)$ ce aparţine unui spaţiu euclidian complex infinit dimensional, care poartă numele de spaţiu Hilbert, iar observabilele sunt reprezentate prin operatori autoadjuncţi acţionând în acest spaţiu"*

Quantum Mechanics in Hilbert Space, S. Eilenberg and H.Bass (eds.), *Academic Press* 1971, pg. 1 şi pg.2..

V.1. Studiul de principiu al integrării ecuaţiei Schrödinger temporale în cazul unei singure dimensiuni spaţiale, ca un exemplu care a condus la dezvoltarea formalismului matematic al mecanicii ondulatorii

In cadrul acestui paragraf, fără a intra în toate detaliile necesare fundamentării matematice riguroase a aspectelor pe care le vom discuta, dorim să punctăm acele rezultate, obţinute din analiza pe cale teoretică (prin integrarea ecuaţiei Schrödinger) a stărilor cuantice ale unui sistem conservativ cu un singur grad de libertate, care au sugerat calea ce trebuie urmată şi teoria matematică cea mai indicată pentru elaborarea formalismului mecanicii ondulatorii, din care s-a dezvoltat apoi formalismul mecanicii cuantice.

Din punct de vedere metodologic, cel mai simplu microsistem pentru care ecuaţia Schrödinger temporală (IV.1.18) este integrabilă exact şi conduce la determinarea spectrului discret al energiei şi a funcţiei de undă $\Psi(x,t)$ în orice moment ulterior momentului iniţial $t=0$ (când starea cuantică descrisă de $\Psi(x,0)=\Phi(x)$ era cunoscută), este reprezentat de o particulă încuteiată în intervalul $[0,a]$ al axei reale, având energia potenţială definită de funcţia

$$(1.1)\qquad V(x)=\begin{cases}\infty\ ;\ x\in(-\infty,0)\\ 0\ ;\ x\in[0,a]\\ \infty\ ;\ x\in(a,\infty)\end{cases}.$$

Evident, valorile infinite ale energiei potenţiale pe $(-\infty,0)\cup(a,\infty)$ exprimă tocmai faptul că particula nu poate părăsi intervalul $[0,a]$, deoarece din legea conservării energiei

$$(E_c+V)_{(-\infty,0)}=(E_c)_{[0,a]}=(E_c+V)_{(a,\infty)}$$

rezultă $(E_c)_{(0,a)}=\infty$, adică particule liberă în intervalul $[0,a]$ ar trebui să posede o energie infinită pentru a penetra spre stânga, sau spre dreapta, peretele de potenţial infinit din $x=0$ şi respectiv din $x=a$. Cu alte cuvinte, în nici o stare

de energie finită $E<\infty$ particula nu se poate găsi în afara domeniului $[0,a]$, ceea ce înseamnă, în baza interpretării date de Max Born funcţiei de undă (a particulei), că

(1.2) $\Psi(x,t)\equiv 0$ *pe* $(\mathbb{R}-(0,a))x\mathbb{R}$.

Din (1.2) şi din condiţia de continuitate în tot spaţiul funcţiei de undă, deducem că aceasta trebuie să satisfacă "condiţiile la frontieră"

(1.3)
a) $\lim\limits_{x\to 0}\Psi(x>0,t)=\Psi(0,t)=0,\ (\forall)\ t\in\mathbb{R}$

b) $\lim\limits_{x\to a}\Psi(x<a,t)=\Psi(a,t)=0,\ (\forall)\ t\in\mathbb{R}$

şi, de asemenea, că funcţia $\Phi(x):\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ corespunzătoare stării cuantice iniţiale

(1.4) $\Psi(x,0)=\Phi(x)$,

trebuie să îndeplinească "condiţia de compatibilitate"

(1.5) $\Phi(x)\equiv 0$ *pe* $\mathbb{R}-[0,a]$.

Toate aceste aspecte ne permit să reformulăm problema integrării ecuaţiei Schrödinger (IV.1.18), pentru sistemul considerat, sub forma următoarei "probleme mixte cu condiţii pe frontieră de speţa I":

Să se găsească funcţia complexă de variabile reale $\Psi(x,t)$ de clasă $C^2[(0,a)x(0,\infty)]\cap C^0[[0,a]x[0,\infty)]$, care satisface

- ecuaţia Schrödinger

(1.6) $$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{2m_0}{\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

în domeniul $(0,a)x(0,\infty)$,

- condiţia iniţială

(1.7) $$\Psi(x,0_+)=\Phi(x)$$

peste tot în $[0,a]$ şi

- condiţiile pe frontieră

(1.8) $$\Psi(0,t)=\Psi(a,t)=0$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în orice moment $t \geq 0$;

funcţia $\phi(x): [0,a] \to \mathbb{C}$, de clasă $C^0[0,a]$, satisfăcând condiţia de compatibilitate

$$\Phi(0) = \Phi(a) = 0. \tag{1.9}$$

Pentru rezolvarea problemei mixte (1.6)-(1.9) se cunosc mai multe metode, dintre care o vom alege pe aceea care admite o interpretare fizică directă, ce poate fi specificată "pas cu pas", în toate etapele ei de aplicare. Astfel, sistemul fiind conservativ, funcţia de undă corespunzătoare stărilor staţionare este de forma

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right), \tag{1.10}$$

care transformă ecuaţia (1.6) în ecuaţia Schrödinger atemporală

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}E\psi = 0, \tag{1.11}$$

iar condiţiile pe frontieră (1.8), în "condiţiile la capete"

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{1.12}$$

pentru funcţia de amplitudine $\psi(x)$ pe intervalul $[0,a] \in \mathbb{R}$. Dacă ar exista stări staţionare de energie negativă $E = -|E|$, atunci soluţia generală a ecuaţiei (1.11) ar fi de forma

$$\psi(x) = A_1\exp(kx) + A_2\exp(-kx) \ , \ cu \ k = \left[\frac{2m_0|E|}{\hbar^2}\right]^{1/2} \ ; \ A_1, A_2 \in \mathbb{C} \tag{1.13}$$

şi ar trebui să verifice condiţiile la capete (1.12), adică

$$\text{a)} \quad A_1 + A_2 = 0$$

$$\text{b)} \quad e^{ka}A_1 + e^{-ka}A_2 = 0. \tag{1.14}$$

Deoarece

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{ka} & e^{-ka} \end{vmatrix} = -2sh(ka) \neq 0 \text{ pentru } |E| > 0,$$

rezultă că sistemul liniar şi omogen (1.14) nu admite decât soluţia banală $A_1 = A_2 = 0$, deci $\psi(x) \equiv 0$ pe $[0,a]$, adică particula încuteiată nu poate avea stări staţionare de energie negativă. In cazul $E=0$ funcţia de amplitudine (1.13) ia valoarea constantă

$$\psi = A_1 + A_2$$

şi după cum rezultă din (1.14.a), sau (1.14.b) cu $k=0$, aceasta este din nou identic nulă pe segmentul $[0,a]$. Observăm cu această ocazie, că am reconfirmat prin altă metodă rezultatul (IV.4.12), care afirmă că singura soluţie cu sens fizic a ecuaţiei Schrödinger staţionare pentru microparticula liberă, de energie nulă, este soluţia banală.

Dacă $E>0$, comportarea microparticulei în groapa de potenţial cu pereţi infiniţi (1.18) se modifică radical. Soluţia generală a ecuaţiei Schrödinger (1.11) devine de tip (spaţial-) armonic

$$(1.15) \quad \psi(x) = C_1 \exp(ikx) + C_2 \exp(-ikx) \text{ , cu } k = \left(\frac{2m_0 E}{\hbar^2}\right)^{1/2} > 0$$

şi conduce, prin impunerea condiţiilor la capete (1.12), la sistemul liniar şi omogen

$$(1.16) \quad \begin{aligned} C_1 + C_2 &= 0 \\ e^{ika} C_1 + e^{-ika} C_2 &= 0, \end{aligned}$$

pe care trebuie să îl verifice constantele $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$. De data aceasta determinantul caracteristic este de forma

$$(1.17) \quad \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{ikx} & e^{-ikx} \end{vmatrix} = -2i\sin(ka),$$

din care rezultă că pentru fiecare valoare

(1.18) $k = k_n = \frac{n\pi}{a}$, *cu* $n \in \mathbb{N}$

care reprezintă o rădăcină a ecuaţiei

(1.19) $\sin(ka) = 0$,

sistemul (1.16) admite soluţia nebanală

(1.20) $C_2 = -C_1$,

iar soluţia generală (1.15) a ecuaţiei Schrödinger staţionare (1.11) ia forma particulară

(1.21) $\psi_n(x) = C\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)$, *cu* $C = -2iC_1, n \in \mathbb{N}$,

care este soluţia problemei Sturm-Liouville (1.11)-(1.12) pe intervalul $[0,a]$, corespunzătoare valorii

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_0}k_n^2,$$

adică

(1.22) $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0}\cdot n^2$, $n \in \mathbb{N}$,

a energiei particulei în starea fizică de număr cuantic n. Din relaţiile (1.21), (1.22) şi (1.10) obţinem funcţia de undă în starea staţionară de energie E_n

(1.23) $\Psi_n(x,t) = C\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2\cdot t\right]$

şi, deoarece aceasta verifică ecuaţia Schrödinger temporală (1.6), ajungem la concluzia că stările permise ale particulei scalar nerelativiste în groapa de potenţial cu pereţi infiniţi (1.11) formează o mulţime numărabilă caracterizată de şirul infinit al funcţiilor de stare $\{\Psi_n(x,t) \mid n \in \mathbb{N}\}_{n=\overline{1,\infty}}$ aflat în corespondenţă biunivocă cu spectrul discret $\{E_n\}_{n=\overline{1,\infty}}$ de valori permise ale energiei. Din considerente pe care le vom expune ceva mai târziu, aceste stări poartă

BUCHAREST / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

denumirea de stări proprii. Este important de observat din relaţiile (1.21), (1.22) şi (1.23) că dacă particula se găsea la momentul iniţial $t=0$ în starea proprie de energie E_n, cu n fixat, atunci ea se afla la orice moment ulterior $t>0$ în aceeaşi stare proprie şi astfel, în baza interpretării probabiliste a funcţiei de undă, rezultă că

$$(1.24)\quad \int_0^a |\Psi_n(x,t)|^2 dx = 1,$$

adică fiecare din funcţiile $\{\Psi_n(x,t) \mid n\in\mathbb{N}\}_{n=\overline{1,\infty}}$, care corespund stărilor proprii de energii $\{E_n \mid n\in\mathbb{N}\}_{n=\overline{1,\infty}}$, este normată la unitate. Utilizând (1.23) în condiţia de normare (1.24), aceasta capătă forma

$$|C|^2 \int_0^a \sin^2\left(n\pi\frac{x}{a}\right)dx = \frac{a}{2}|C|^2 = 1,$$

din care deducem, pentru constata complexă C, valoarea

$$(1.25)\quad C = \sqrt{\frac{2}{a}}\cdot e^{i\alpha}\ ,\ \alpha\in\mathbb{R}.$$

Deoarece $|e^{i\alpha}|=1$, acest termen nu afectează densitatea de probabilitate $\rho_n(x,t)=|\Psi_n(x,t)|^2$ şi avem deci posibilitatea de a fixa la zero valoarea fazei α, ceea ce ne conduce la expresia funcţiei de undă normate

$$(1.26)\quad \Psi_n(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}n^2\cdot t\right],$$

în starea proprie de număr cuantic $n\in\mathbb{N}$, a particulei scalare nerelativiste încutiate în intervalul $[0,a]$.

Pe lângă proprietatea (1.24), funcţiile de stare (1.26) au şi proprietatea de a fi liniar independente, adică nici una dintre ele nu se poate exprima în raport cu celelalte prin intermediul unei combinaţii liniare cu coeficienţi

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

complexi diferiţi de zero. Această proprietate, care din punct de vedere fizic exprimă de asemenea faptul că dacă particula, în lipsa unor perturbaţii exterioare, se afla iniţial într-o stare proprie, atunci ea va rămâne în aceasta în toate momentele ulterioare, se poate demonstra imediat după cum urmează. Utilizând relaţia (1.22) pentru a prescurta notaţia argumentului exponenţialei ce intervine în (1.26), să înmulţim $\Psi_n(x,t)$ cu $\Psi_{n'}^*(x,t)$, cu $n' \neq n$ şi să integrăm după x de la 0 la a. Obţinem relaţia

$$\int_0^a \Psi_{n'}^*(x,t)\,\Psi_n(x,t)\,dx = \tag{1.27}$$

$$= \frac{2}{a}\left[\int_0^a \sin\left(n'\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)dx\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t\right],$$

care se poate scrie sub forma

$$\int_0^a \Psi_{n'}^*(x,t)\,\Psi_n(x,t)\,dx = \tag{1.28}$$

$$= \left\{\int_0^1 [\cos[(n'-n)\pi\xi] - \cos[(n'+n)\pi\xi]]\,d\xi\right\}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)t},$$

din care rezultă

$$\int_0^a \Psi_{n'}^*(x,t)\Psi_n(x,t)\,dx = 0\ ,\ n' \neq n\,. \tag{1.29}$$

Deoarece pentru $n'=n$ integrala din (1.29) este chiar integrala din (1.24), putem să reprezentăm aceste două relaţii într-o formă condensată, utilizând tensorul δ al lui Kronecher, adică

$$\int_0^a \Psi_{n'}^*(x,t)\Psi_n(x,t)\,dx = \delta_{n'n},\ \text{unde}\ \delta_{n'n} = \begin{cases} 0,\ pt.\ n' \neq n \\ 1,\ pt.\ n' = n \end{cases}. \tag{1.30}$$

Presupunând că $\Psi_n(x,t)$ este combinaţia liniară a tuturor celorlalte funcţii

normate $\{\Psi_m(x,t)\,|\,m\in\mathbb{N}\}_{m\neq n}$, adică

(1.31) $\Psi_n(x,t)=\sum_{m\neq n} c_{nm}\Psi_m(x,t)$, cu $c_{nm}\neq 0,(\forall)m\in\mathbb{N}-\{n\}$,

atunci, înlocuind (1.31) în (1.29), obţinem

(1.32) $\int_0^a \Psi_n^*(x,t)\Psi_n dx=\sum_{m\neq n} c_{nm}\int_0^a \Psi_n^*(x,t)\Psi_m(x,t)\,dx=0$.

Cum relaţia (1.30) este valabilă oricare ar fi $n',n\in\mathbb{N}$, relaţia (1.32) devine

(1.33) $\sum_{m\neq n} c_{nm}\int_0^a \Psi_{n'}^*(x,t)\Psi_m(x,t)\,dx=\sum_{m\neq n} c_{nm}\delta_{n'm}=0$,

ceea ce înseamnă că

(1.34) $c_{nn'}\equiv 0$ *pt.* $(\forall)n'\in\mathbb{N}-\{n\}$,

adică într-adevăr funcţiile normate $\{\Psi_n(x,t)\,|\,n\in\mathbb{N}\}_{n=\overline{1,\infty}}$, de forma (1.26), sunt toate liniar independente.

Să trecem acum la ultima etapă în rezolvarea problemei mixte (1.6)-(1.9), adică să analizăm modul în care poate fi îndeplinită condiţia iniţială (1.7) peste tot în $[0,a]$. Pentru aceasta, să observăm că din liniaritatea ecuaţiei (1.6) şi din faptul că toate funcţiile normate liniar independente $\{\Psi_n(x,t)\,|\,n\in\mathbb{N}\}_{n=\overline{1,\infty}}$, date de (1.26), sunt soluţii ale sale, satisfăcând pe frontieră (adică la capetele $x=0,x=a$) condiţiile (1.8), rezultă că soluţia generală a ecuaţiei (1.6), cu condiţiile (1.8) pe frontieră, este dată formal de expresia

(1.35) $\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\Psi_n(x,t)$,

cu forma concretă

(1.36) $\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right]$,

BUCUREŞTI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde $\{E_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ sunt date de relaţiile (1.22), iar $\{c_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ este un şir infinit de constante complexe ce urmează a fi determinate. Pentru $t\to 0_+$, soluţia generală devine

$$(1.37)\quad \Psi(x,0_+)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)$$

şi trebuie să coincidă, în baza condiţiei iniţiale (1.7), cu funcţia de undă $\Phi(x):[0,a]\to\mathbb{C}$, de clasă $C^0[0,a]$, care îndeplineşte la capete condiţia de compatibilitate (1.9). Deci

$$(1.38)\quad \Phi(x)=\sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right),\ 0\le x\le a.$$

Inmulţind ambii membri cu $\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right), m\in\mathbb{N}$ şi integrând de la $x=0$ la $x=a$, obţinem

$$(1.39)\quad \sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a \Phi(x)\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)dx=\sum_{n=1}^{\infty}\left\{c_n\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)dx\right\},$$

unde integrala prezentă în membrul din dreapta are, după cum am văzut la demonstrarea relaţiei (1.30), valoarea

$$(1.40)\quad \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)dx=\delta_{nm}.$$

Utilizând (1.40) în (1.39) şi renotând cu n indicele m, obţinem expresia coeficienţilor Fourier $\{c_n\}$ ai funcţiei $\Phi(x)\in C[0,a]$

$$(1.41)\quad c_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a \Phi(x)\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)dx,\ n=1,2,\ldots,$$

care, în baza lemei lui Riemann, nu numai că există dar şi converg la zero

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pentru n tinzând la infinit. De asemenea, dat fiind că $|\Phi(x)|^2$ este continuă pe compactul $[0,a]$, rezultă că $\Phi(x)$ este pătratic integrabilă pe acesta, adică

$$(1.42)\quad \int_0^a \Phi^*(x)\Phi(x)\,dx < \infty$$

şi astfel, seria Fourier (1.37) converge tare la funcţia $\Phi(x)$, ceea ce înseamnă că soluţia (1.36) a ecuaţiei Schrödinger (1.6), îndeplinind "condiţiile la capete" (1.8) şi având coeficienţii Fourier $\{c_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de forma (1.41), satisface peste tot în $[0,a]$ condiţia iniţială (1.7). Din (1.42), (1.32) şi (1.40) obţinem şirul de relaţii:

$$\int_0^a |\Phi(x)|^2 dx = \int_0^a \Phi^*(x)\Phi(x)dx =$$

$$(1.43)\quad = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)dx =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \delta_{nm} = \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 < \infty$$

şi cum din punct de vedere fizic

$$(1.44)\quad \int_0^a |\Phi(x)|^2 dx = 1,$$

rezultă din (1.43) că

$$(1.45)\quad \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 = 1.$$

Dacă notăm cu σ_n sumele parţiale ale seriei din (1.45),

$$\sigma_n = \sum_{m=1}^{n}|c_m|^2,$$

care au în mod evident proprietatea

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\lim_{n\to\infty}\sigma_n = 1,$$

putem să scriem (1.45) sub forma

$$\sigma_n + \sum_{m=n+1}^{\infty} |c_m|^2 = 1$$

din care deducem că

(1.46) $$\lim_{n\to\infty}\sum_{m=n+1}^{\infty} |c_m|^2 = 1 - \lim_{n\to\infty}\sigma_n = 0.$$

Cu ajutorul acestei relaţii şi a normei

(1.47) $$\|f(x,t)\| = \left[\int_0^a |f(x,t)|^2 dx\right]^{1/2},$$

definite la orice moment $t\in[0,T]\subset[0,\infty)$ pe mulţimea funcţiilor pătratic integrabile pe $[0,a]$ şi "cel puţin" continue în raport cu t pe compactul $[0,T]$, obţinem, din (1.36), relaţia

$$\lim_{n\to\infty}\left\|\Psi(x,t) - \sum_{m=1}^{n} c_m\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)\right]e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}\right\|^2 =$$

$$= \lim_{n\to\infty}\left\{\sum_{r=n+1}^{\infty}\sum_{s=n+1}^{\infty} c_r^* c_s\left[\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(r\pi\frac{x}{a}\right)\sin\left(s\pi\frac{x}{a}\right)dx\right]e^{\frac{i}{\hbar}(E_r - E_s)t}\right\} =$$

$$= \lim_{n\to\infty}\sum_{s=n+1}^{\infty}\sum_{s=n+1}^{\infty} c_r^* c_s \delta_{rs}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_r - E_s)t\right] = \lim_{n\to\infty}\sum_{m=n+1}^{\infty}|c_m|^2 = 0,$$

care demonstrează că şirul de funcţii

$$\Phi_n(x,t)=\sum_{m=1}^{n}\left\{\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a\Phi(\chi)\sin\left(m\pi\frac{\chi}{a}\right)d\chi\right]\cdot\right.$$

$$\left.\cdot\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(m\pi\frac{x}{a}\right)\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_m t\right)\right\},n\in\mathbb{N}$$

pătratic integrabile pe $[0,a]$ pentru orice $t\in[0,\infty)$, este convergent în norma (1.47) către funcţia $\Psi(x,t)$ (pătratic integrabilă pe $[0,a]$) uniform în raport cu t pe $[0,\infty)$ şi astfel

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\Phi(\chi)\sin\left(n\pi\frac{\chi}{a}\right)d\chi\right]\cdot\right.$$

$$\left.\cdot\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\right]\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}\cdot n^2\cdot t\right)\right\}$$

reprezintă soluţia problemei mixte (1.6)-(1.9) pentru microparticula scalar-nerelativistă unidimensional (- spaţial) încutiată.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

V.2. Elemente de teoria spaţiilor Hilbert

In studiile avansate de Mecanică Cuantică, formalismul utilizat de aceasta reclamă cunoaşterea amănunţită a cât mai multora dintre rezultatele obţinute şi metodele folosite în cadrul unor domenii importante din Matematicile Superioare cum ar fi Teoria Grupurilor şi Algebrelor, Teoria Măsurii, Ecuaţii Diferenţiale, Teoria Spaţiilor Hilbert, Analiza Funcţională, Teoria Fibratelor, etc. Cum despre fiecare dintre acestea s-au scris şi se vor scrie serii întregi de tratate, este imposibilă prezentarea unitară, destul de completă, a cunoştinţelor fundamentale din toate aceste domenii în paginile unei singure cărţi de dimensiuni rezonabile. Din acest motiv, chiar dacă, atât în paragraful de faţă, cât şi în celelalte paragrafe ale acestui capitol şi ale celui următor, nu întreprindem cercetări avansate de Mecanică Cuantică, ci expunem doar bazele matematice ale sale, vom conferi subiectului o structură constructivistă, fără pretenţii de exhaustivitate.

A. SPATII LINIARE

Definiţia 2.1. O mulţime L este un spaţiu liniar (ale cărui elemente se numesc vectori) peste un corp K (ale cărui elemente se numesc scalari) dacă este dotată cu două operaţii binare, una internă (adunarea) şi alta externă (Inmulţirea cu scalari), satisfăcând axiomele:

I. L este un grup abelian faţă de adunare

II. Următoarele relaţii sunt verificate oricare ar fi $\psi,\varphi \in L$ şi $a,b \in K$:

(1) $1\ \psi = \psi$, 1 fiind elementul neutru faţă de înmulţire din K,

(2) $(ab)\psi = a(b\psi)$

(3) $(a+b)\psi = a\psi + b\psi$

(4) $a(\psi+\varphi) = a\psi + a\varphi$.

BCU "CAROL I" BUCUREŞTI LIBRARY

Definiţia 2.2. Un spaţiu liniar peste corpul $\mathbb{K}=\mathbb{R}$ (sau $\mathbb{K}=\mathbb{C}$) se numeşte spaţiu liniar real (respectiv, complex).

Teorema 2.1. In orice spaţiu liniar L există un singur vector $\mathbf{0}$ şi pentru orice $\psi \in L$ elementul invers $(-\psi)$ este unic.

Demonstraţia rezultă imediat din axioma I, deoarece în orice grup există un singur element neutru şi, pentru orice element al unui grup, elementul invers este unic.

Definiţia 2.3. Sistemul de vectori $\psi_1, \psi_2, ..., \psi_m$ pentru care relaţia

$$\sum_{i=1}^{m} c_i \psi_i = \mathbf{0} \text{ implică } c_i=0 \text{ pentru fiecare } i \in \{1,2,...,m\},$$

se numeşte liniar independent, iar în caz contrar, liniar dependent.

Observaţie la definiţia 2.3 In terminologia curentă se spune despre un sistem liniar independent (de vectori) că este un sistem de vectori liniar independenţi. (Idem în cazul sistemelor liniar dependente).

Definiţia 2.4. O mulţime S, finită sau infinită, de vectori din L este un sistem de vectori liniar independenţi dacă elementele oricărei submulţimi $T \subset S$, formată dintr-un număr finit de vectori diferiţi din S, sunt vectori liniar independenţi.

Desigur, în cazul când mulţimea S este formată dintr-un număr finit de vectori $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}<\infty}$ din L, cele două definiţii (2.3) şi (2.4) coincid, deoarece, dacă S este un sistem liniar independent în sensul definiţiei 2.4, rezultă că mulţimea $T=\{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}<\infty}$ este formată numai din vectori liniar independenţi, adică

$$\sum_{i=1}^{m} c_i \psi_i = \mathbf{0} \quad \Leftrightarrow \quad c_i \equiv 0, \quad i=\overline{1,m}$$

ceea ce înseamnă că S este "liniar independent" şi în sensul definiţiei 2.3; invers, dacă S este un sistem liniar independent în sensul definiţiei 2.3 atunci,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

anulând de la început un număr oarecare $s \leq m-1$ de coeficienţi c_i, rezultă că cei $r=m-s$ vectori "rămaşi", care formează submulţimea $T_{(r)}$ a lui S, sunt liniar independenţi, adică toate submulţimile $T_{(r)}$ de vectori diferiţi din S sunt sisteme liniar independente şi deci, în sensul definiţiei 2.4, S este un sistem liniar independent. Importanţa definiţiei 2.4 este evidentă când S este o mulţime infinită de vectori din L deoarece, după cum vom vedea imediat, cu ajutorul ei se poate defini dimensiunea unui spaţiu liniar chiar şi în cazul când aceasta este infinită.

Definiţia 2.5. Se numeşte dimensiunea unui spaţiu liniar L, şi se notează $dim L$, numărul maxim de vectori liniar independenţi care există în L. Dacă $dim L = n < \infty$, spaţiul liniar este finit dimensional. Dacă pentru orice n există încă un vector liniar independent de primii n vectori liniar independenţi, atunci L este infinit dimensional, adică $dim L = \infty$.

Definiţia 2.6. O mulţime Γ, finită sau infinită, de vectori din L se numeşte sistem generator al lui L, dacă orice vector $\psi \in L$ este o combinaţie liniară

$$\psi = \sum_{i \in I} a^i \varphi_i \quad , a^i \in \mathbb{K} \ (\forall) \ i \in I,$$

formată cu un număr finit, $card\ I < \infty$, $I \subset \mathbb{N}$, de vectori φ_i din Γ.[1]

Definiţia 2.7. Un sistem generator liniar independent, $\Gamma = S = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ al lui L este o bază a spaţiului vectorial L.

Observaţie: ori de câte ori va fi nevoie, pentru a evita confuziile ce pot să apară între o familie oarecare $\{\psi_i\}$ de vectori din L şi o bază B a lui

[1] In cazul unui spaţiu de convergenţă (noi ne vom referi în special la spaţii în care convergenţa este definită prin intermediul normei), putem renunţa la condiţia card I $< \infty$

L, vom nota cu χ_i vectorii bazei şi cu $B[L]=\{\chi_i\}_{i=\overline{1,dimL}}$ baza spaţiului liniar L.

Teorema 2.2. Dacă $B[L]=\{\chi_i\}_{i=\overline{1,d}}$ (cu $d=n<\infty$ sau $d=\infty$) este o bază în spaţiul liniar L, atunci orice vector $\psi\in L$ se exprimă unic sub forma:

$$\psi = \sum_{i=1}^{d} a^i\chi_i \quad , \quad a^i \in \mathbb{K}. \tag{2.1}$$

Demonstraţie. Din definiţia 2.7 rezultă că $B[L]$ este un sistem generator al lui L şi deci, în acord cu definiţia 2.6, orice vector $\psi\in L$ este o combinaţie liniară de elemente ale lui B, adică ψ se poate reprezenta sub forma (2.1). Pentru a demonstra unicitatea acestei descompuneri, să presupunem că există şi un alt set de coeficienţi $\{b^i\}_{i=\overline{1,d}}$ astfel încât

$$\psi = \sum_{i=1}^{d} b^i\chi_i. \tag{2.2}$$

Inmulţind ambii membri ai relaţiei (2.2) cu -1 şi sumând "membru cu membru" cu relaţia (2.1), obţinem

$$\sum_{i=1}^{d} c^i\chi_i = \sum_{i=1}^{d} (a^i-b^i)\,\chi_i = \psi-\psi = \mathbf{0} \tag{2.3}$$

şi cum, în baza definiţiei 2.7, $B[L]$ este şi sistem liniar independent, rezultă din definiţia 2.4 (sau 2.3) că toţi coeficienţii c_i sunt zero, adică $b^i= a^i$, ceea ce demonstrează unicitatea relaţiei de descompunere (2.1) a vectorului ψ în raport cu baza $\{\chi_i\}_{i=\overline{1,d}}$ a spaţiului liniar L.

Definiţia 2.8. Coeficienţii $a^i \in \mathbb{K}$, $i=\overline{1,d}$ din relaţia (2.1) se numesc coordonatele (sau componentele) vectorului ψ în raport cu baza $B[L]=\{\chi_i\}_{i=\overline{1,d}}$.

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 2.3. Intr-un spaţiu liniar n-dimensional L orice sistem B de "n" vectori liniar independenţi $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ este o bază a lui L.

Demonstraţie. Din definiţia 2.5 rezultă că n este numărul maxim de vectori liniari independenţi din L şi astfel, pentru orice alt vector $\psi \in L$, rezultă că sistemul $\{\psi_1,...\psi_n, \psi\}$ este liniar dependent în L adică există scalarii $\{c_1,...,c_n,c_{n+1}\}$, nu toţi zero, astfel încât

$$(2.4) \qquad \sum_{i=1}^{n} (c_i\psi_i) + c_{n+1}\psi = \mathbf{0}.$$

Cum c_{n+1} este diferit de zero, fiindcă altfel ar rezulta din (2.4) că vectorii $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ sunt liniar dependenţi (ceea ce este fals prin ipoteză) şi cum K este un corp, obţinem din (2.4) că

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} \left[\left(-\frac{c_i}{c_{n+1}} \right) \psi_i \right],$$

adică

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i \quad , \; a^i = -\frac{c_i}{c_{n+1}} \quad , \; i=\overline{1,n}$$

şi deci sistemul liniar independent $\{\psi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ este şi sistem generator al spaţiului liniar L. Din definiţia 2.7 rezultă imediat că cei n vectori liniar independenţi ψ_i formează o bază în L. (q.e.d.)

Teorema 2.4. Orice bază $B[L]$, a spaţiului liniar finit dimensional L, are *card* $B[L]$ = *dim* L [49].

Demonstraţie. Fie m = *card* $B[L]$ şi n = *dim* L. Ca idee, algoritmul demonstraţiei este următorul:

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(i) Dacă $m>n$, rezultă că există în L un sistem de maxim m vectori liniar independenţi, ceea ce este fals, deoarece, în baza definiţiei 2.5, numărul maxim de vectori liniar independenţi din L este n. Prin urmare, $m = card\ B[L] \leq n = dim\ L$.

(ii) Pe de altă parte, dacă $m<n$, atunci rezultă, tot din definiţia 2.5 că există în L un număr de $n-m$ vectori liniar independenţi faţă de cei m vectori al bazei $B[L]$. Prin urmare, aceşti $n-m$ vectori din L nu vor putea fi exprimaţi prin relaţii de forma (2.1) în raport cu vectorii bazei $B[L]$, adică ajungem la concluzia că $B[L]$ nu este un sistem generator al spaţiului liniar L, ceea ce din nou este fals, deoarece, prin ipoteză, $B[L]$ formează o bază în L. Rezultă $m=n$.

O demonstraţie amănunţită şi elegantă a acestei teorema, şi care are la bază algoritmul (i)-(ii), se găseşte de exemplu în lucrarea [49].

Definiţia 2.9. O mulţime nevidă $L' \subset L$ este un subspaţiu liniar al lui L dacă ea însăşi este un spaţiu liniar faţă de aceleaşi operaţii şi peste acelaşi corp ca şi spaţiul liniar L.

Teorema 2.5. Condiţia necesară şi suficientă pentru ca $L' \subset L$ să fie subspaţiu liniar al lui L este ca, pentru orice $\psi, \varphi \in L'$ şi $a \in K$, să avem

(2.5) $(\psi+\varphi) \in L'$ şi $(a\psi) \in L'$.

Demonstraţie. Necesitatea condiţiei este banală. Condiţia este şi suficientă deoarece, din $a=-1 \in K$ şi $a\psi \in L'$, rezultă $-\psi \in L'$, adică ψ posedă $-\psi$ ca element invers, iar din $(\psi+\varphi) \in L'$, luând $\varphi = -\psi$, rezultă $\psi - \psi = 0 \in L'$, adică existenţa elementului neutru faţă de adunare. Restul axiomelor sunt satisfăcute deoarece $L \supset L'$ este spaţiu liniar. (q.e.d.).

Teorema 2.6. O submulţime nevidă $L' \subset L$ este un subspaţiu liniar al lui L dacă şi numai dacă

(2.6) $(a\psi+b\varphi)\in L'$, $(\forall)$ $\psi,\varphi\in L'$ şi $a,b \in K$.

Demonstraţie. (i) Necesitatea. Dacă L' este subspaţiu liniar al lui L atunci pentru oricare $\psi,\varphi \in L'$ şi $a,b \in K$ avem $(a\psi)\in L'$ şi $(b\varphi)\in L'$ şi deci $(a\psi)+(b\varphi) = (a\psi+b\varphi)\in L'$.

(ii) Suficienţa. Pentru $a=b=1$ rezultă $(\psi+\varphi)\in L'$ oricare ar fi vectorii $\psi,\varphi \in L'$, iar pentru $b=0$ rezultă $(a\psi)\in L'$ oricare ar fi $\psi\in L'$ şi $a\in K$. Aplicând acum teorema 2.5 rezultă că L' este subspaţiu liniar. (q.e.d.)

Teorema 2.7. Fie $T=\{\tau_i\}_{i=\overline{1,m}}$ un sistem de vectori din L. Mulţimea

(2.7) $$L'=\left\{\varphi\in L \mid \varphi=\sum_{i=1}^{m} b^i\tau_i\ ,\ b^i\in K\right\}$$

este un subspaţiu liniar al lui L.

Demonstraţie. Vom utiliza rezultatul teoremei 2.6. Fie $\varphi_{(1)}$ şi $\varphi_{(2)}$ din L' daţi de relaţiile:

$$\varphi_{(1)}=\sum_{i=1}^{m} b_1^i\tau_i \text{ şi } \varphi_{(2)}=\sum_{i=1}^{m} b_2^i\tau_i.$$

Oricare ar fi scalarii $a,b \in K$, avem

$$a\varphi_{(1)}+ b\varphi_{(2)}=\sum_{i=1}^{m}\left[\left(ab_1^i+ bb_2^i\right)\tau_i\right] = \sum_{i=1}^{m} c^i\tau_i,$$

adică $\left(a\varphi_{(1)}+ b\varphi_{(2)}\right) \in L'$, oricare ar fi $\varphi_{(1)}$, $\varphi_{(2)}$ din L' şi a,b din K. Rezultă imediat, aplicând teorema 2.6, că L' este un subspaţiu liniar.

Observaţie. Subspaţiul L' definit prin relaţia (2.7) se numeşte

subspaţiul generat de sistemul $T = \{\tau_i\}_{i=\overline{1,m}}$ şi se notează $L' = span(T)$.

Teorema 2.8. Fie în spaţiul liniar n-dimensional L, un sistem liniar independent $S = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}}$ cu $m<n$. Atunci, există în L vectorii $\{\psi_k\}_{k=\overline{m+1,n}}$ astfel încât mulţimea $B = S \cup \{\psi_k\}_{k=\overline{m+1,n}}$ să fie o bază $B[L] = \{\psi_r\}_{r=\overline{1,n}}$ a spaţiului vectorial L.

Demonstraţie. Deoarece $L' = span(S)$ şi S este liniar independent, rezultă din definiţia 2.7 că $S = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}}$ este o bază în L' şi deci, din teorema 2.4, $dim\ L' = card\ S = m<n = dim\ L$. Ca urmare, $L-L' \neq \varnothing$ şi vectorul $\mathbf{0} \notin L-L'$. Alegând în $L-L'$ un vector oarecare, pe care îl notăm cu ψ_{m+1}, rezultă că sistemul $S_{(m+1)} = \{\psi_i, \psi_{m+1}\}_{i=\overline{1,m}}$ este liniar independent şi generează subspaţiul $L'' = span(S_{(m+1)})$ de dimensiune $m+1$. Dacă $m+1<n$, alegem în $L-L''$ un vector arbitrar ψ_{m+2} şi astfel sistemul $S_{(m+2)} = \{\psi_i, \psi_{m+1}, \psi_{m+2}\}_{i=\overline{1,m}}$ liniar independent va genera subspaţiul $L''' = span(S_{(m+2)})$, $m+2-dimensional$. Evident, prin repetarea acestui procedeu, vom obţine "pas cu pas" şi celelalte sisteme liniar independente $S_{(m+3)} = S_{(m+2)} \cup \{\psi_{m+3}\}, \ldots$, până la sistemul $S_{(m+n-m)} = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}} \cup \{\psi_k\}_{k=\overline{m+1,n}} = \{\psi_r\}_{r=\overline{1,n}}$ inclusiv, care, având $card\ S_{(n)} = n = dim L$ (şi fiind liniar independent) este, conform teoremei 2.3, baza $B[L]$ a lui L. (q.e.d.)

Teorema 2.9. Fie L un spaţiu liniar n dimensional şi L' un subspaţiu propriu al lui L. Atunci $dim L' < dim L$.

Demonstraţia rezultă imediat aplicând teorema 2.8 deoarece, dacă L' este diferit de $\{0\}$ şi L, orice bază $B[L']$ va putea fi completată până la o bază

$B[L]$ în L şi deci

(2.8) $dim\ L' = card\ B[L'] < card\ B[L] = dim\ L$ (q.e.d.)

Teorema 2.10. Fie L' şi L'' două subspaţii liniare ale lui L. Atunci, $Y = L' \cap L''$ este de asemenea un subspaţiu liniar al lui L.

Demonstraţie. Fie ψ,φ două elemente ale lui Y. Rezultă $\psi,\varphi \in L'$ şi $\psi,\varphi \in L''$, iar din faptul că L' şi L'' sunt subspaţii liniare, rezultă că $(\psi+\varphi) \in L'$ şi $(\psi+\varphi) \in L''$, adică $(\psi+\varphi) \in L' \cap L'' = Y$. Similar, din $a\psi \in L'$ şi $a\psi \in L''$ rezultă $a\psi \in L' \cap L'' = Y$ şi astfel, în baza teoremei 2.6, $Y = L' \cap L''$ este subspaţiu liniar al lui L. (q.e.d.)

Definiţia 2.10. Suma $\sum = L' \oplus L''$ a două subspaţii liniare ale lui L este mulţimea tuturor vectorilor

(2.9) $\psi = \psi_{(1)} + \psi_{(2)}$

cu $\psi_{(1)} \in L'$ şi $\psi_{(2)} \in L''$.

Teorema 2.11. $\sum$ este un subspaţiu liniar al lui L.

Demonstraţie. Fie $\psi_{(1)}, \varphi_{(1)} \in L'$ şi $\psi_{(2)}, \varphi_{(2)} \in L''$. Atunci, $(\psi_{(1)}+\varphi_{(1)}) \in L'$, $(\psi_{(2)}+\varphi_{(2)}) \in L''$, $a\psi_{(1)} \in L'$ şi $a\psi_{(2)} \in L''$, $\forall\ a \in K$, deoarece L' şi L'' sunt subspaţii liniare. In consecinţă, împreună cu vectorii $\psi = \psi_{(1)} + \psi_{(2)}$ şi $\varphi = \varphi_{(1)} + \varphi_{(2)}$ vor aparţine lui $\sum$, conform definiţiei 2.10 şi vectorii $\psi+\varphi = (\psi_{(1)} + \psi_{(2)}) + (\varphi_{(1)}+\varphi_{(2)})$ şi $a\psi = a\psi_{(1)} + a\psi_{(2)}$; din teorema 2.5, rezultă imediat că $\sum$ este un subspaţiu liniar al lui L. (q.e.d.)

Teorema 2.12. Fie $\sum = L' \oplus L''$, cu L', L'' subspaţii liniare ale lui L. Atunci

(2.10) $dim \sum = dim\ L' + dim\ L'' - dim\ Y$, unde $Y = L' \cap L''$.

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţia este prezentată în mod detaliat în tratatul [65].

Definiţia 2.11. Dacă $Y = L' \cap L'' = \varnothing$ atunci suma $\sum$ a celor două subspaţii se numeşte <u>sumă directă</u> şi se notează $\sum_o = L' \oplus L''$.

Teorema 2.13. Orice vector ψ din $\sum_o = L' \oplus L''$ se scrie în mod <u>unic</u> sub forma

(2.11) $\psi = \psi_{(1)} + \psi_{(2)}$,

unde $\psi_{(1)} \in L'$ şi $\psi_{(2)} \in L''$.

Demonstraţie. Să presupunem că avem pentru vectorul $\psi \in \sum_o$ a doua descompunere $\psi = \varphi_{(1)} + \varphi_{(2)}$. Atunci, $\psi_{(1)} + \psi_{(2)} = \varphi_{(1)} + \varphi_{(2)}$ implică $\psi_{(1)} - \varphi_{(1)} = \varphi_{(2)} - \psi_{(2)}$, adică vectorul $\omega = \psi_{(1)} - \varphi_{(1)} = \varphi_{(2)} - \psi_{(2)}$ aparţine atât lui L' cât şi lui L'', ceea ce ar însemna că $\omega \in L' \cap L''$. Dar, conform ipotezei, $Y = L' \cap L'' = \varnothing$ deci $\omega = 0$, adică $\psi_{(1)} = \varphi_{(1)}$ şi $\psi_{(2)} = \varphi_{(2)}$, ceea ce demonstrează unicitatea descompunerii $\psi = \psi_{(1)} + \psi_{(2)}$. (q.e.d.)

Definiţia 2.12. Dacă L este un spaţiu liniar şi $L = L' \oplus L''$, atunci L'' <u>se numeşte subspaţiul complementar lui L' în L</u>. Evident, L' va fi subspaţiul complementar lui L'' în L şi deci L' şi L'' sunt unul complementarul celuilalt faţă de L.

Se poate demonstra, vezi de exemplu [65].

Teorema 2.14. Orice subspaţiu L' al unui spaţiu vectorial L <u>admite cel puţin un subspaţiu complementar</u> faţă de L.

Definiţia 2.13. Două spaţii liniare L_1, L_2 peste acelaşi corp K sunt <u>izomorfe</u> dacă există o aplicaţie <u>bijectivă</u> $f : L_1 \to L_2$ având proprietăţile:

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(i) $f(\psi_{(1)}+\varphi_{(1)}) = f(\psi_{(1)})+ f(\varphi_{(1)}) = \psi_{(2)}+ \varphi_{(2)}$

(ii) $f(a\psi_{(1)}) = af(\psi_{(1)}) = a\psi_{(2)}$ oricare ar fi $\psi_{(1)},\varphi_{(1)}\in L_1$ şi $a\in K$

(evident $\psi_{(2)}=f(\psi_{(1)})$ şi $\varphi_{(2)}=f(\varphi_{(1)})$ aparţin lui L_2).

După cum se cunoaşte din teoria structurilor algebrice şi a aplicaţiilor între acestea, izomorfismul este o relaţie reflexivă, simetrică şi tranzitivă, adică este o relaţie de echivalenţă. Rezultă de aici că toate spaţiile liniare izomorfe (între ele) au o structură vectorială identică, posedând (de exemplu) aceeaşi dimensiune.

Teorema 2.15. Toate spaţiile liniare n-dimensionale L, peste corpul $\mathbb{C}$ (sau $\mathbb{R}$), sunt izomorfe cu spaţiul liniar $\mathbb{C}^n$ (sau $\mathbb{R}^n$).

Demonstraţie. Fie L un spaţiu liniar n-dimensional şi $B[L]=\{\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ o bază în el. Din teorema 2.2 rezultă că orice vector $\psi\in L$ se exprimă unic în raport cu $B[L]$ prin relaţia (2.1) unde a^i, $i=\overline{1,n}$, sunt numere complexe (sau reale) dacă corpul K este $\mathbb{C}$ (sau $\mathbb{R}$). In consecinţă, aplicaţia

$$(2.12)\quad f(\psi) = \begin{pmatrix} a^1 \\ . \\ . \\ . \\ a^n \end{pmatrix}$$

de la L la $\mathbb{C}^n$ este o bijecţie. Considerând în L un al doilea vector φ exprimat prin relaţia $\varphi=\sum_{i=1}^{n} b^i\chi_i$, astfel încât $f(\varphi)$ este dată de

$$(2.13)\quad f(\varphi) = \begin{pmatrix} b^1 \\ . \\ . \\ . \\ b^n \end{pmatrix},$$

observăm imediat că

$$f(\psi+\varphi) = f\left(\sum_{i=1}^{n}(a^i+b^i)\chi_i\right) = \begin{pmatrix} a^1+b^1 \\ . \\ . \\ . \\ a^n+b^n \end{pmatrix} =$$

$$(2.14)$$

$$= \begin{pmatrix} a^1 \\ . \\ . \\ . \\ a^n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b^1 \\ . \\ . \\ . \\ b^n \end{pmatrix} = f(\psi) + f(\varphi),$$

şi de asemenea că

$$(2.15)\quad f(a\psi) = \begin{pmatrix} aa^1 \\ . \\ . \\ . \\ aa^n \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} a^1 \\ . \\ . \\ . \\ a^n \end{pmatrix} = af(\psi),$$

deci bijecţia $f : L \to \mathbb{C}^n$ este un izomorfism. (q.e.d.).

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B. INZESTRAREA SPATIILOR LINIARE: PRODUSUL SCALAR SI NORMA INDUSA DE ACESTA

Definiţia 2.14. O aplicaţie $L \times L \to \mathbb{C}$, unde L este un spaţiu liniar complex iar $\mathbb{C}$ este corpul numerelor complexe, notată $(\psi,\varphi) \in \mathbb{C}$, se numeşte produs scalar dacă sunt satisfăcute următoarele axiome:

I. $(\psi,\psi) \geq 0$, $(\forall)\ \psi \in L$ şi $(\psi,\psi)=0$ dacă şi numai dacă $\psi = \mathbf{0}$

II. $(\psi, a\varphi) = a(\psi,\varphi)$, $(\forall)\ a \in \mathbb{C}$ şi $\psi,\varphi \in \mathbb{C}$

III. $(\psi+\varphi,\chi) = (\psi,\chi)+(\varphi,\chi)$, $(\forall)\ \psi,\varphi,\chi \in L$

IV. $(\psi,\varphi) = (\varphi,\psi)^*$, $(\forall)\ \psi,\varphi \in L$ (cu * reprezentând conjugarea complexă).

Teorema 2.16. Produsul scalar se bucură de următoarele proprietăţi:

a) $(\mathbf{0},\psi)=(\psi,\mathbf{0})=0$, $(\forall)\,\psi \in L$

b) $(\psi,\varphi+\chi)=(\psi,\varphi)+(\psi,\chi)$, $(\forall)\ \psi,\varphi,\chi \in L$

(2.16) c) $(a\psi,\varphi) = a^*(\psi,\varphi)$, $(\forall)\ a \in \mathbb{C}$ şi $\psi,\varphi \in L$

d) $|(\psi,\varphi)| \leq \frac{1}{2}[(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)]$, $(\forall)\ \psi,\varphi \in L$

e) $|(\psi,\varphi)|^2 \leq (\psi,\psi)\cdot(\varphi,\varphi)$, $(\forall)\ \psi,\varphi \in L$.

Inegalitatea (2.16.e) se numeşte inegalitatea Cauchy-Schwarz-Buniakowski.

Demonstraţie. Ne vom baza pe axiomele de la definiţia 2.14, fără să mai indicăm de fiecare dată pe care dintre ele am utilizat-o. Astfel, avem

$$(\mathbf{0},\psi)=(0\psi,\psi)=0(\psi,\psi)=0 \text{ şi } (\psi,\mathbf{0})=(\mathbf{0},\psi)^*=0,$$

ceea ce dovedeşte relaţia (2.16.a). In continuare avem

$$(\psi,\varphi+\chi)=(\varphi+\chi,\psi)^*=(\varphi,\psi)^*+(\chi,\psi)^*=(\psi,\varphi)+(\psi,\chi)$$

şi

$$(a\psi,\varphi)=(\varphi,a\psi)^*=[a(\varphi,\psi)]^*=a^*(\varphi,\psi)^*=a^*(\psi,\varphi),$$

adică am demonstrat relaţiile (2.16.b) şi (2.16.c). Pentru a stabili inegalităţile (2.16.d) şi (2.16.e), să observăm că axioma I impune inegalitatea

(2.17) $(\psi-c\varphi,\psi-c\varphi)\geq 0$,

oricare ar fi $c\in\mathbb{C}$ şi $\psi,\varphi\in L$. Rezultă astfel

$$(\psi-c\varphi,\psi-c\varphi)=(\psi,\psi-c\varphi)-(c\varphi,\psi-c\varphi)=$$

$$=(\psi,\psi)-c(\psi,\varphi)-c^*(\varphi,\psi-c\varphi)=$$

$$=(\psi,\psi)-c(\psi,\varphi)-c^*(\varphi,\psi)+|c|^2(\varphi,\varphi)$$

adică este valabilă inegalitatea

(2.18) $(\psi,\psi)-c(\psi,\varphi)-c^*(\varphi,\psi)+|c|^2(\varphi,\varphi)\geq 0$, $(\forall)$ $c\in\mathbb{C}$ şi $\psi,\varphi\in L$.

Dacă alegem $c=(\varphi,\psi)/|(\psi,\varphi)|$, obţinem din (2.18) inegalitatea

$$(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)-2|(\psi,\varphi)|\geq 0,$$

care reprezintă tocmai proprietatea (2.16.d). Dacă slegem $c=(\varphi,\psi)/(\varphi,\varphi)$, (2.18) devine

$$(\psi,\psi)-\frac{|(\psi,\varphi)|^2}{(\varphi,\varphi)}\geq 0,$$

ceea ce înseamnă evident

$$|(\psi,\varphi)|^2\leq(\psi,\psi)\cdot(\varphi,\varphi),$$

adică tocmai inegalitatea Cauchy-Schwarz-Buniakowski. (q.e.d.).

Definiţia 2.15. Orice spaţiu liniar, peste $\mathbb{C}$ sau $\mathbb{R}$, pe care s-a definit un produs scalar se numeşte spaţiu euclidian şi se notează (de obicei) cu E.

Definiţia 2.16. Despre doi vectori ψ,φ din E se spune că sunt ortogonali dacă produsul scalar al lor este zero, adică $(\psi,\varphi)=0$.

Definiţia 2.17. Fie E un spaţiu euclidian şi $O=\{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}}$ un sistem de vectori din acesta. Se spune că O este un sistem ortogonal dacă

$(\psi_i,\psi_k)=0$, pentru $i\neq k$, $(\forall)$ $i,k\in\{1,2,...,m\}$.

Sistemele ortogonale, pentru care vectorul $\mathbf{0}$ nu este un element al lor, au următoarea proprietate importantă:

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 2.17. Orice sistem ortogonal $O_+ = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}}$ care nu conţine vectorul $\mathbf{0}$ este un sistem liniar independent.

Demonstraţie. Dacă O_+ ar fi un sistem liniar dependent atunci ar exista scalarii c_i, cu $i=\overline{1,m}$, nu toţi zero, astfel încât

$$(2.19)\quad \sum_{i=1}^{m} c_i\psi_i = \mathbf{0}.$$

Fie ψ_k un vector oarecare din O_+ şi să calculăm produsul scalar al acestuia cu vectorul $\mathbf{0}$ dat de relaţia (2.19). Obţinem

$$\left(\psi_k, \sum_{i=1}^{m} c_i\psi_i\right) = \sum_{i=1}^{m} c_i \left(\psi_k,\psi_i\right) = \left(\psi_k,\mathbf{0}\right) = 0$$

şi, deoarece O_+ este un sistem ortogonal, rezultă ecuaţia

$$\left(\psi_k,\psi_k\right)\cdot c_k = 0\ ,\ (\forall)\ k=\overline{1,m},$$

în care, evident $\left(\psi_k,\psi_k\right) \neq 0$ deoarece $\psi_k \in O_+$ (şi O_+ nu conţine vectorul $\mathbf{0}$). Rezultă astfel, că toţi coeficienţii $c_i \in \mathbb{C}$ sunt nuli şi deci

$$\sum_{i=1}^{m} c_i\psi_i = \mathbf{0} \text{ implică } c_1 = c_2 = \ldots = c_m = 0,$$

adică, în acord cu definiţia 2.3, sistemul $O_+ = \{\psi_i\}_{i=\overline{1,m}}$ este un sistem liniar independent. (q.e.d.)

Teorema 2.18. Fie E un spaţiu euclidian n-dimensional şi $O_+ \subset E$ un sistem ortogonal (care nu conţine vectorul $\mathbf{0}$). Atunci, are loc relaţia

$$card\ O_+ \leq n.$$

Demonstraţia este imediată deoarece, în baza definiţiei 2.5, n reprezintă numărul maxim de vectori liniar independenţi din E şi cum O_+

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

este un sistem liniar independent (teorema 2.17) de vectori din E, rezultă că nu poate avea mai mult de n vectori (liniar independenţi). (q.e.d.)

Teorema 2.19. Intr-un spaţiu euclidian n-dimensional orice sistem ortogonal $O_+ \subset E$, pentru care *card* $O_+ = n$, formează o bază a lui E, numită bază ortogonală şi notată $B_o[E]$.

Demonstraţie. Din teorema 2.17, rezultă că O_+ este un sistem liniar independent. Cum *card* $O_+ = n$, rezultă din teorema 2.3 că $O_+ = B_o[E]$ este o bază (de vectori ortogonali) a lui E. (q.e.d.)

Definiţia 2.18. Două subspaţii E_1, E_2 ale spaţiului euclidian E se numesc ortogonale şi se notează $E_1 \perp E_2$, dacă oricare doi vectori $\psi_{(1)} \in E_1$ şi $\psi_{(2)} \in E_2$ sunt ortogonali, adică

(2.20) $(\psi_{(1)}, \psi_{(2)}) = 0$, $(\forall)\ \psi_{(1)} \in E_1$ şi $\psi_{(2)} \in E_2$.

Definiţia 2.19. Fie F un subspaţiu al lui E. Mulţimea vectorilor din E ortogonali oricărui vector din F $\{ \psi \in E \mid (\psi, \varphi) = 0 , (\forall)\ \varphi \in F \}$ se numeşte subspaţiul complementar ortogonal al lui F şi se notează cu $F^\perp$.

Referitor la subspaţiile complementar ortogonale se poate demonstra (a se vedea de exemplu [65])

Teorema 2.20. Suma directă a oricărui subspaţiu $F \subset E$, cu complementul său ortogonal $F^\perp$, coincide cu întregul spaţiu E, adică $F \oplus F^\perp = E$.

Definiţia 2.20. Se numeşte normă pe spaţiul liniar complex (sau real) L o aplicaţie $L \to \mathbb{R}$, notată cu $\|\cdot\|$, care satisface axiomele:

I. $\|\psi\| \geq 0$, $(\forall)\ \psi \in L$ şi $\|\psi\| = 0$ dacă şi numai dacă $\psi = 0$

II. $\|a\psi\| = |a| \cdot \|\psi\|$, $(\forall)\ a \in \mathbb{C}$ şi $\psi \in L$

III. $\|\psi + \varphi\| \leq \|\psi\| + \|\varphi\|$, $(\forall)\ \psi, \varphi \in L$ (inegalitatea triunghiului).

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 2.21. Un spaţiu liniar pe care s-a definit o normă se numeşte spaţiu normat.

Teorema 2.21. Pe orice spaţiu euclidian E aplicaţia $\|\cdot\| : E \to \mathbb{R}$, definită de

(2.21) $\|\psi\| = \sqrt{(\psi,\psi)}$, $(\forall)\ \psi \in E$,

este o normă denumită norma indusă de produsul scalar, sau simplu, norma euclidiană.

Demonstraţie. Din însăşi definiţia aplicaţiei (2.21) este clar că aceasta verifică atât axioma I a definiţiei 2.20 a normei, cât şi axioma I a definiţiei 2.14 a produsului scalar. Faptul că aplicaţia (2.21) verifică axioma II a definiţiei normei este de asemenea foarte uşor de demonstrat:

$$\|a\psi\| = \sqrt{(a\psi,a\psi)} = \left[|a|^2(\psi,\psi)\right]^{1/2} = |a|\sqrt{(\psi,\psi)} = |a|\cdot\|\psi\|.$$

In vederea verificării axiomei III, să explicităm $\|\psi+\varphi\|^2$; rezultă

$$\|\psi+\varphi\|^2 = (\psi+\varphi,\psi+\varphi) = (\psi,\psi)+(\psi,\varphi)+(\psi,\varphi)^*+(\varphi,\varphi),$$

adică

(2.22) $\|\psi+\varphi\|^2 = \|\psi\|^2+2Re(\psi,\varphi)+\|\varphi\|^2$.

Dar, pentru orice număr complex $a = a_1+ia_2$, avem

$Re(a) = a_1 \le \sqrt{a_1^2+a_2^2} = |a|$ şi astfel, din 2.22, rezultă inegalitatea

$$\|\psi+\varphi\|^2 = \|\psi\|^2+2Re(\psi,\varphi)+\|\varphi\|^2 \le \|\psi\|^2+2|(\psi,\varphi)|+\|\varphi\|^2,$$

care devine, prin intermediul inegalităţii Cauchy-Schwarz-Buniakowski,

$$\|\psi+\varphi\|^2 \le \|\psi\|^2+2|(\psi,\varphi)|+\|\varphi\|^2 \le \|\psi\|^2+2\|\psi\|\cdot\|\varphi\|+\|\varphi\|^2,$$

adică

$$\|\psi+\varphi\|^2 \le [\|\psi\| + \|\varphi\|]^2,$$

ceea ce reprezintă, evident, inegalitatea triunghiului. (q.e.d.)

Definiţia 2.22. Dacă E este un spaţiu euclidian normat, se spune că sistemul ortogonal $O_+ \subset E$ este un sistem ortonormat dacă fiecare din vectorii săi are norma egală cu 1.

Teorema 2.22. In orice spaţiu euclidian normat E există cel puţin o bază ortonormală $\underline{B}[E]=\{\chi_i\in E \mid (\chi_i,\chi_k)=\delta_{ik},\ (\forall)\ \chi_i,\chi_k\in E\}_{i=\overline{1,dimE}}$.

Demonstraţie. Fie $B[E]=\{\psi_i\}_{i=\overline{1,n}}$, cu $n=$ *dim* E, o bază (oarecare) a lui E. Vom construi mai întâi o bază ortogonală $B_o[E]=\{\sigma_i\}_{i=\overline{1n}}$, aplicând procedeul Gramm-Schmidt. Să luăm $\sigma_1=\psi_1$ şi să considerăm că vectorul ψ_2 este o combinaţie liniară de forma

$$\psi_2=\sigma_2+a_{21}\sigma_1,$$

a vectorului σ_1 cu un alt vector σ_2, presupus ortogonal pe σ_1. Să procedăm la fel cu vectorul ψ_3, adică să considerăm că acesta este o combinaţie liniară

$$\psi_3=\sigma_3+a_{31}\sigma_1+a_{32}\sigma_2,$$

în care σ_3 este presupus ortogonal pe vectorii ortogonali σ_1,σ_2. Continuând acest procedeu, obţinem că fiecare vector $\psi_i\in B[E]$ se poate reprezenta "formal" prin combinaţia liniară

$$(2.23)\quad \psi_i=\sigma_i+\sum_{k=1}^{i-1}a_{ik}\sigma_k\ ,\ 2\le i\le n,$$

a celor "i" vectori $\{\sigma_1,\sigma_2,...,\sigma_i\}$ din E, presupuşi ortogonali, adică rezultă sistemul de vectori

$$(2.24)\quad \begin{aligned}&\sigma_1=\psi_1\\ &\cdots\\ &\sigma_i=\psi_i-\sum_{k=1}^{i-1}a_{ik}\sigma_k\\ &\cdots\\ &\sigma_n=\psi_n-\sum_{k=1}^{n-1}a_{nk}\sigma_k.\end{aligned}$$

Pentru ca reprezentarea (2.23) (deci implicit şi sistemul (2.24)) să fie

"efectivă" şi nu doar "formală", trebuie să existe în $\mathbb{C}$, şi să fie unici pentru o bază $B[E]$ dată, toţi scalarii a_{ik}, astfel încât vectorii σ_i să formeze un sistem ortogonal O_+, de cardinal $n = dim\ E$. In adevăr, pentru $i= 2,3,...,n$ şi $k= \overline{1,i-1}$ (deci $k<i$), efectuând produsul scalar al vectorului σ_k cu vectorul σ_i, exprimat ca în relaţia (2.24), avem

$$0=(\sigma_k,\sigma_i)=\left(\sigma_k,\psi_i-\sum_{l=1}^{i-1}a_{il}\sigma_l\right)=(\sigma_k,\psi_i)-\sum_{l=1}^{i-1}a_{il}(\sigma_k,\sigma_l),$$

de unde rezultă, prin impunerea condiţiei de ortogonalitate a vectorilor $\{\sigma_l\}_{l=\overline{1,n}}$, expresia concretă

$$(2.25)\quad a_{ik}=\frac{(\sigma_k,\psi_i)}{(\sigma_k,\sigma_k)}$$

a fiecăruia din scalarii a_{ik}. Mai trebuie să arătăm că toţi vectorii $\sigma_1,...,\sigma_n$ sunt diferiţi de vectorul $\mathbf{0}$, fiindcă altfel, împărţirea prin $(\sigma_k,\sigma_k)=\|\sigma_k\|^2$ ar fi lipsită de sens. Că vectorul $\sigma_1= \psi_1$ este diferit de zero, este evident căci $\psi_1\in B[E]$ şi cum aceasta este o bază în E, ea nu poate conţine vectorul $\mathbf{0}$. Dacă σ_2 ar fi $\mathbf{0}$, atunci $\psi_2= a_{21}\psi_1$, adică $\psi_2-a_{21}\psi_1=\mathbf{0}$, ceea ce este imposibil, deoarece ψ_1,ψ_2 fiind vectori ai bazei $B[E]$, sunt liniar independenţi. In mod cu totul analog rezultă că pentru fiecare din toate celelalte valori ale lui i (adică $i= 3,4,...,n$), dacă σ_i ar fi $\mathbf{0}$ atunci ψ_i ar fi o combinaţie liniară a vectorilor $\psi_1,...,\psi_{i-1}$, deci sistemul $\{\psi_1,...,\psi_{i-1},\psi_i\}$ ar fi liniar dependent, ceea ce este fals în mod evident, deoarece $B[E]$ este o bază a lui E. Ajungem astfel la concluzia că scalarii a_{ik} din siatemul (2.24), exprimaţi prin formula (2.25), determină complet, din aproape în aproape, sistemul ortogonal $O_+= \{\sigma_i\}_{i=\overline{1,n}}$

şi cum *card* O_+ = *card* $B[E]$ = *dim* E, rezultă din teorema 2.19 că O_+ este o bază ortogonală a lui E, adică $O_+ = B_o[E] = \{\sigma_i\}_{i=\overline{1,n}}$. Ajunşi în această etapă, demonstraţia este practic încheiată deoarece, E fiind un spaţiu euclidian normat, obţinem, prin multiplicarea vectorului σ_i cu $\|\sigma_i\|^{-1}$, că vectorul

$$\chi_i = \frac{1}{\|\sigma_i\|} \cdot \sigma_i \tag{2.26}$$

este de normă egală cu 1 şi deci sistemul $\{\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ este (în sensul definiţiei 2.22) un sistem ortogonal de cardinal egal cu dimensiunea lui E. Astfel $B[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$, cu $(\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik}$, este într-adevăr o bază ortonormală în spaţiul euclidian normat E. (q.e.d.)

Definiţia 2.23. O aplicaţie a mulţimii $\mathbb{N}$ (a numerelor naturale) în spaţiul liniar L se numeşte <u>şir</u> şi se notează cu $\{\psi_n\}$, unde $\psi_n \in L$ corespunde lui $n \in \mathbb{N}$.

Definiţia 2.24. Spaţiul liniar L este un <u>spaţiu de convergenţă</u> dacă mulţimea M a tuturor şirurilor din L are o submulţime M_c, ale cărei elemente se numesc <u>şiruri convergente</u>, care satisface următoarele condiţii:

1) Există o aplicaţie $\lim : M_c \to L$, adică oricărui şir $\{\psi_n\}$ din M_c îi corespunde în L un element ψ care se numeşte <u>limita şirului</u> $\{\psi_n\}$. Se scrie

$$\psi_n \to \psi \quad \textit{sau} \quad \lim_{n\to\infty} \psi_n = \psi$$

2) Dacă pentru orice $n \in \mathbb{N}$ avem $\psi_n = \psi$ atunci $\psi_n \to \psi$.

3) Dacă $\{\varphi_n\}$ este un <u>subşir</u> al lui $\{\psi_n\}$ şi $\psi_n \to \psi$, atunci şi

$\varphi_n \to \psi$.

4) Dacă $\psi_n \to \psi$ şi $\varphi_n \to \varphi$ atunci

$$a\psi_n + b\varphi_n \to a\psi + b\varphi \ , \ (\forall)\ a,b \in \mathbb{C}.$$

5) Dacă şirul de numere complexe $\{a_n\}$ converge la $a \in \mathbb{C}$, atunci

$$a_n\psi \to a\psi \ , \ (\forall)\ \psi \in L.$$

Definiţia 2.25. Un şir $\{\psi_n\}$ dintr-un spaţiu normat L este convergent dacă există în L un element ψ, numit limita şirului, astfel ca pentru orice număr real $\varepsilon > 0$ şi $n > N(\varepsilon)$ să avem

$$\|\psi - \psi_n\| < \varepsilon .$$

Se poate demonstra imediat

Teorema 2.23. Convergenţa indusă de normă, adică cea dată de definiţia 2.25, satisface axiomele 1)-5) ale definiţiei 2.24, deci orice spaţiu normat poate fi organizat ca un spaţiu de convergenţă.

Definiţia 2.26. Sirul $\{\psi_n\}$ al spaţiului normat L se numeşte şir Cauchy (sau şir fundamental), dacă pentru orice $\varepsilon > 0$ există $N(\varepsilon)$ a.î.

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \varepsilon \ , \ (\forall)\ n,m > N(\varepsilon).$$

Teorema 2.24. Orice şir convergent este un şir Cauchy.

Demonstraţie. Fie $\{\psi_n\}$ un şir convergent şi ψ limita sa. Atunci, există $N(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ pentru $\varepsilon > 0$ astfel încât

$$\|\psi - \psi_n\| < \frac{\varepsilon}{2} \text{ şi } \|\psi - \psi_m\| < \frac{\varepsilon}{2} \ , \ (\forall)\ n,m > N(\varepsilon).$$

Conform axiomei III de la definiţia normei avem

$$\|\psi_n - \psi_m\| = \|(\psi - \psi_m) + (\psi_n - \psi)\| \le \|\psi - \psi_m\| + \|\psi - \psi_n\|,$$

adică

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon \ , \ (\forall)\ n,m > N(\varepsilon)$$

BCU IASI - BIBLIOTECA CENTRALA UNIVERSITARA

şi deci $\{\psi_n\}$ este şir Cauchy. (q.e.d.)

Observaţie. Reciproca teoremei 2.23 nu este în general adevărată, adică există spaţii liniare normate în care nu orice şir Cauchy este un şir convergent. Astfel, grupul aditiv $(Q,+)$ al numerelor raţionale formează un spaţiu liniar normat peste corpul Q cu norma $\|x\|=|x|$. In acest spaţiu există şiruri Cauchy care tind spre numere iraţionale şi astfel, neavând limite din Q, aceste şiruri nu sunt convergente în Q.

Definiţia 2.26. Spaţiile liniare înzestrate cu diverse proprietăţi suplimentare poartă următoarele denumiri:

a) Complet, dacă orice şir Cauchy este convergent;
b) Banach, dacă este normat şi complet faţă de convergenţa indusă de normă;
c) prehilbertian, dacă este înzestrat cu produs scalar şi normat cu norma indusă de produsul scalar (deci dacă este euclidian normat);
d) Hilbert, dacă este prehilbertian şi complet (sau, cu alte cuvinte, dacă este un spaţiu Banach cu normă euclidiană)

C. SPATII HILBERT SEPARABILE

Definiţia 2.27. Intr-un spaţiu de convergenţă L (inclusiv spaţiul în care convergenţa este undusă de normă), submulţimea $L'\subset L$ este densă în L, dacă orice $\psi\in L$ este limita unui şir $\{\psi_n\}\in L'$.

Definiţia 2.28. Un spaţiu de convergenţă L se numeşte separabil dacă are o mulţime densă numărabilă.

Teorema 2.25. Un spaţiu normat L care are o bază numărabilă este separabil.

Demonstraţie. Fie $\{\psi_i\}$ o bază în L şi P mulţimea tuturor

polinoamelor cu coeficienţi raţionali formate cu elementele bazei. P este o mulţime numărabilă, deoarece atât $\{\psi_i\}$ cât şi mulţimea Q (a numerelor raţionale) sunt numărabile. Vom arăta că P este densă în L. Pe de o parte, pentru orice $\psi \in L$ avem

$$(2.27)\quad \psi = \sum_{i=1}^{\infty} a^i \psi_i,$$

deci fiind dat $\varepsilon > 0$ există $n \in \mathbb{N}$ astfel încât

$$(2.28)\quad \left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i \right\| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Pe de altă parte, pentru orice a^i avem

$$(2.29)\quad a^i = \lim_{n\to\infty} c^i{}_n, \quad cu \quad c^i{}_n \in Q$$

şi deci

$$(2.30)\quad \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i = \sum_{i=1}^{n} \lim_{k\to\infty} c^i{}_k \, \psi_i.$$

In consecinţă există $k \in \mathbb{N}$ astfel încât

$$(2.31)\quad \left\| \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i - \sum_{i=1}^{n} c^i{}_k \, \psi_i \right\| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Cu ajutorul relaţiilor (2.28) şi (2.31) obţinem

$$\left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} c^i{}_k \, \psi_i \right\| = \left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i + \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i - \sum_{i=1}^{n} c^i{}_k \psi_i \right\| \leq$$

$$\leq \left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i \right\| + \left\| \sum_{i=1}^{n} a^i \psi_i - \sum_{i=1}^{n} c^i{}_k \psi_i \right\| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon,$$

adică rezultă

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(2.32)\quad \left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} c^{i}{}_{k}\psi_i \right\| < \varepsilon,$$

deci limita polinoamelor $\sum_{i=1}^{n} c^{i}{}_{k}\,\psi_i \in P$ este $\psi \in L$, ceea ce demonstrează într-adevăr că P este densă în L. (q.e.d.)

Teorema 2.26. Dacă $\chi_1,\chi_2,\ldots,\chi_n$ este un sistem ortonormal din spaţiul euclidian normat E, atunci pentru orice $\psi \in E$ este valabilă inegalitatea

$$(2.33)\quad \|\psi\|^2 \geq \sum_{i=1}^{n} |(\chi_i,\psi)|^2,$$

numită inegalitatea lui Bessel.

Demonstraţie. Pentru orice $a_i \in \mathbb{C}$, cu $i=\overline{1,n}$, avem

$$(2.34)\quad \left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} a_i\chi_i \right\|^2 \geq 0,$$

adică

$$\left(\psi - \sum_{i=1}^{n} a_i\chi_i, \psi - \sum_{i=1}^{n} a_i\chi_i\right) =$$

$$(2.35)\quad = \|\psi\|^2 - \sum_{i=1}^{n} a_i^{*}(\chi_i,\psi) - \sum_{i=1}^{n} a_i(\psi,\chi_i) + \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 =$$

$$= \|\psi\|^2 - \sum_{i=1}^{n} |(\chi_i,\psi)|^2 + \sum_{i=1}^{n} |a_i - (\chi_i,\psi)|^2 \geq 0.$$

Valoarea minimă din stânga inegalităţii se realizează pentru

$$(2.36)\quad a_i = (\chi_i,\psi), \quad \text{cu } i=\overline{1,n},$$

şi în această situaţie, (2.35) se reduce la inegalitatea lui Bessel (2.33).

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 2.27. Dacă $\{\chi_i\}$ este un şir ortonormal şi $\psi \in E$ atunci $\{\varphi_n\}$, dat de

$$\varphi_n = \sum_{i=1}^{n} a_i \chi_i \ , \text{ cu } a_i = (\chi_i, \psi),$$

este un şir Cauchy.

Demonstraţie. Pentru $\|\varphi_n - \varphi_m\|^2$ obţinem

$$\|\varphi_n - \varphi_m\|^2 = \left\| \sum_{i=m+1}^{n} a_i \chi_i \right\|^2 = \sum_{i=m+1}^{n} \sum_{k=m+1}^{n} a_i^* a_k (\chi_i, \chi_k) = \tag{2.37}$$

$$= \sum_{i=m+1}^{n} |a_i|^2 = \sum_{i=m+1}^{n} |(\chi_i, \psi)|^2.$$

Dar, teorema 2.26 ne arată că $\left\{ \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 \right\}_n$ este un şir monoton şi mărginit, deci convergent. Rezultă că pentru un ε fixat ($\varepsilon > 0$) există $N(\varepsilon)$ astfel încât

$$\sum_{i=m+1}^{n} |a_i|^2 = \sum_{i=m+1}^{n} |(\chi_i, \psi)|^2 < \varepsilon \text{ pentru } m, n > N(\varepsilon),$$

ceea ce, împreună cu (2.37), demonstrează teorema enunţată.

Teorema 2.28. Relaţia lui Parseval

$$\|\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2$$

reprezintă condiţia necesară şi suficientă pentru ca să avem

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \chi_i \ , \text{ cu } a_i = (\chi_i, \psi) \text{ şi } (\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik}. \tag{2.38}$$

Demonstraţia este imediată, deoarece pentru scalarii $a_i \in \mathbb{C}$, daţi de (2.36), avem

$$\left\| \psi - \sum_{i=1}^{n} (\chi_i, \psi) \chi_i \right\|^2 = \|\psi\|^2 - \sum_{i=1}^{n} |(\chi_i, \psi)|^2 \tag{2.39}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ceea ce înseamnă că dacă are loc relaţia lui Parseval atunci

$$(2.40)\quad \psi=\sum_{i=1}^{\infty}(\chi_i,\psi)\chi_i,$$

şi respectiv, dacă are loc (2.38), atunci este satisfăcută relaţia lui Parseval. (q.e.d.)

Definiţia 2.29. Sistemul ortonormal $T = \{\chi_i\}$ din spaţiul Hilbert E se numeşte sistem total (sau se spune că este total), dacă singurul vector $\varphi\in E$ care verifică relaţia $(\varphi,\chi_i)=0$ pentru orice $i\in\mathbb{N}$ este vectorul $\mathbf{0}$, adică

$$(\varphi,\chi_i)=0 \Rightarrow \varphi=\mathbf{0}\ ,\ (\forall)\ i=1,2,...$$

Teorema 2.29. Dacă spaţiul Hilbert are bază numărabilă atunci condiţia necesară si suficientă ca sistemul ortonormal $T=\{\chi_i\}$ să fie o bază (ortonormală) este ca T să fie total.

Demonstraţie. Condiţia este neceasară deoarece, dacă $T=\{\chi_i\}$ este o bază în spaţiul Hilbert E, putem scrie

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty}(\chi_i,\psi)\chi_i$$

şi cum $(\chi_i,\psi)=0$ pentru toate valorile lui i din $\mathbb{N}$, rezultă $\psi=\mathbf{0}$, adică mulţimea de elemente ortonormale $\{\chi_i\}$ este o mulţime totală. Pentru a demonstra suficienţa, să presupunem că şirul total $\{\chi_i\}$ nu formează o bază în E. Atunci, există $\varphi\in E$ astfel încât

$$\varphi-\sum_{i=1}^{\infty}(\chi_i,\varphi)\chi_i = \tau \in E \text{ şi } \tau\neq\mathbf{0},$$

ceea ce înseamnă că, pentru orice $k\in\mathbb{N}$ vom avea

$$(\chi_k,\varphi)-\sum_{i=1}^{\infty}(\chi_i,\varphi)(\chi_k,\chi_i)=(\chi_k,\varphi)-(\chi_k,\varphi)=(\chi_k,\tau)$$

de unde rezultă $(\chi_k, \tau)=0$, $(\forall)\ k\in\mathbb{N}$, deci $\tau=\mathbf{0}$, ceea ce este în mod evident, contrar ipotezei şi deci, $T=\{\chi_i\}$ formează o bază (ortonormală) a spaţiului Hilbert E.

Teorema 2.30. Intr-un spaţiu Hilbert separabil H există baze ortonormale $B[H]=\{\chi_i\}$ cel mult numărabile.

Demonstraţie. Fie U o mulţime numărabilă şi densă în H, având elementele $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \ldots$ Să reţinem din U partea de elemente liniar independente. Reţinem primul element nenul din $\{\nu_i\}$ şi îl notam cu σ_1. Apoi, reţinem din $\{\nu_i\}$ primul element din cel ce urmează lui σ_1, notat σ_2, care satisface condiţia de a forma împreună cu σ_1 un sistem liniar independent. La fel procedăm mai departe şi obţinem şirul $\{\sigma_i\}$. Aplicând procedeul Gramm-Schmidt, ortonormalizăm şirul $\{\sigma_i\}$ şi obţinem şirul $\{\chi_i\}$. Vom arăta că aceasta este o bază (ortonormală) în H. In adevăr, să presupunem că pentru orice i avem

(2.41) $\{\psi, \chi_i\}=0$.

Dar atunci, pentru orice j şi orice k, vor avea loc şi relaţiile

(2.42) $\{\psi, \sigma_j\}=0 \quad ; \quad \{\psi, \nu_k\}=0,$

deoarece elementele σ_i sunt combinaţii liniare de χ_i, iar elementele ν_k sunt combinaţii liniare de σ_j. Dat fiind că $\{\nu_k\}$ este dens în H şi evident $\psi\in H$, rezultă că există un subşir convergent către ψ, adică

(2.43) $\psi=\lim_{a\to\infty}\nu_a$.

Estimând, cu ajutorul expresiei (2.43), norma lui ψ obţinem

(2.44) $\|\psi\|=\left(\psi, \lim_{a\to\infty}\nu_a\right)^{1/2}$,

ceea ce înseamnă

(2.45) $\|\psi\|^2 = \lim_{a\to\infty}(\psi, v_a)$,

de unde rezultă, având în vedere a doua ecuaţie din (2.42),

(2.46) $\|\psi\| = 0$

şi astfel, conform axiomei I de la definiţia 2.20 a normei, rezultă $\psi = 0$, adică şirul ortonormal $\{\chi_i\}$ este un şir total şi deci, conform teoremei (2.29), este o bază ortonormală a spaţiului Hilbert separabil H. (q.e.d.)

V.3. Spaţiul Hilbert $\mathfrak{L}^2$ al funcţiilor pătratic integrabile în sens Lebesgue

Deoarece în această lucrare ne ocupăm în special de mecanica cuantică a sistemelor uniparticulă, vom presupune în cele ce urmează că spaţiul de configuraţie este $\mathbb{R}^3$ şi vom începe acest paragraf prin a reaminti o serie de noţiuni fundamentale, cum ar fi măsura unei mulţimi şi noţiunea de mulţime măsurabilă, mulţimi de măsură nulă, funcţii măsurabile şi funcţii Lebesgue integrabile.

Definiţia 3.1. Se numeşte măsură exterioară a mulţimii mărginite $A \subset \mathbb{R}^3$ numărul real şi pozitiv

$$\mu_+(A) = \inf_{D\supset A} V(D),$$

unde $V(D)$ este volumul "deschisului" D din $\mathbb{R}^3$ [62].

Definiţia 3.2. Se numeşte măsură interioară a mulţimii mărginite $A \subset \mathbb{R}^3$ numărul real şi pozitiv

$$\mu_-(A) = \sup_{K\subset A} V(K),$$

unde $V(K)$ este volumul "compactului" K în spaţiul $\mathbb{R}^3$.

Definiţia 3.3. Mulţimea mărginită $A \subset \mathbb{R}^3$ se numeşte măsurabilă dacă $\mu_-(A) = \mu_+(A)$. Numărul real şi pozitiv $\mu(A) = \mu_-(A) = \mu_+(A)$ se numeşte măsura mulţimii A.

Prin utilizarea "aproape directă" a acestor trei definiţii se pot demonstra următoarele rezultate care stau la baza teoriei măsurii şi a mulţimilor măsurabile [62].

Propoziţia 3.1. Pentru orice mulţime mărginită $A \subset \mathbb{R}^3$, $\mu_-(A) \leq \mu_+(A)$.

Propoziţia 3.2. Dacă A, B sunt două mulţimi mărginite în $\mathbb{R}^3$ şi $A \subset B$, atunci $\mu_-(A) \leq \mu_-(B)$ şi $\mu_+(A) \leq \mu_+(B)$.

Propoziţia 3.3. Pentru oricare două mulţimi A, B mărginite în $\mathbb{R}^3$ are loc relaţia $\mu_+(A \cup B) \leq \mu_+(A) + \mu_+(B)$.

Propoziţia 3.4. Dacă $A \subset \mathbb{R}^3$ şi $B \subset \mathbb{R}^3$ sunt două mulţimi mărginite şi disjuncte, atunci $\mu_-(A) + \mu_-(B) \leq \mu_-(A \cup B)$.

Teorema 3.1. Orice deschis mărginit $D \subset \mathbb{R}^3$ este măsurabil şi $\mu(D) = V(D)$.

Teorema 3.2. Orice compact $K \subset \mathbb{R}^3$ este măsurabil şi $\mu(K) = V(K)$.

Considerând, în baza definiţiei 3.3, că mulţimile A, B din propoziţia 3.4 sunt măsurabile, obţinem

Teorema 3.3. Dacă $A \subset \mathbb{R}^3$ şi $B \subset \mathbb{R}^3$ sunt două mulţimi mărginite, disjuncte şi măsurabile, atunci $A \cup B$ este o mulţime măsurabilă, având măsura $\mu(A \cup B) = \mu(A) + \mu(B)$.

Demonstraţie. Din definiţia 3.3 şi propoziţia 3.4 rezultă că

$$\mu(A) + \mu(B) = \mu_-(A) + \mu_-(B) \leq \mu_-(A \cup B),$$

iar din propoziţiile 3.1 şi 3.3, obţinem

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\mu_-(A\cup B)\le \mu_+(A\cup B)\le \mu_+(A)+\mu_+(B)=\mu(A)+\mu(B)$$

şi deci

$$\mu_-(A\cup B)=\mu_+(A\cup B)=\mu(A)+\mu(B).\ \text{(q.e.d.)}$$

In ce priveşte existenţa unui "criteriu de măsurabilitate", aceasta este asigurată de

Teorema 3.4. O mulţime mărginită $A\subset\mathbb{R}^3$ este măsurabilă dacă şi numai dacă pentru orice $E>0$ există o mulţime compactă K şi o mulţime deschisă şi mărginită D astfel încât $K\subset A\subset D$ şi $V(D-K)<\varepsilon$.

Demonstraţie. Fie $\varepsilon>0$ arbitrar fixat. Dacă mulţimea A este măsurabilă, atunci există deschisul mărginit D astfel încât

$V(D)<\mu(A)+\frac{\varepsilon}{2}$ şi, de asemenea, există un compact K astfel încât $V(K)>\mu(A)-\frac{\varepsilon}{2}$. Reprezentând mulţimea D ca reuniunea mulţimilor disjuncte şi măsurabile $(D-K)$ şi K, obţinem conform teoremei 3.3

$$V(D)=V(D-K)+V(K),$$

de unde rezultă

$$V(D-K)=V(D)-V(K)<\mu(A)+\frac{\varepsilon}{2}-\mu(A)+\frac{\varepsilon}{2}=\varepsilon.$$

Invers, compactul $K\subset A$ şi deschisul mărginit $D\supset A$ fiind mulţimi măsurabile (conform teoremelor 3.1 şi 3.2), avem

$$\mu(K)\le\mu_-(A)\ \text{şi}\ \mu_+(A)\le\mu(D)$$

de unde rezultă

$$0\le\mu_+(A)-\mu_-(A)\le\mu(D)-\mu(K)=V(D)-V(K),$$

adică

$$0\le\mu_+(A)-\mu_-(A)\le V(D-K)<\varepsilon$$

şi, cum $\varepsilon>0$ este arbitrar, obţinem $\mu_-(A)=\mu_+(A)$, ceea ce înseamnă, în baza

BCU IAŞI CENTRUL UNIVERSITAR LIBRARY

definiţiei 3.3, că mulţimea A este măsurabilă.

(q.e.d.)

Pe lângă criteriul de măsurabilitate, în aplicaţii sunt foarte utile şi următoarele două teoreme [62], care extind rezultatul teoremei 3.3 la cazul reuniunii unui număr finit de mulţimi măsurabile, disjuncte două câte două şi, respectiv, la cazul unui şir infinit de mulţimi măsurabile disjuncte două câte două.

Teorema 3.5. (*a aditivităţii finite*). Dacă $A_1, A_2, ..., A_n$ sunt mulţimi măsurabile în $\mathbb{R}^3$ şi disjuncte două câte două, atunci mulţimea $\bigcup_{i=1}^{n} A_i$ este măsurabilă şi are măsura

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^{n} A_i\right) = \sum_{i=1}^{n} \mu(A_i).$$

Teorema 3.6. (*a aditivităţii numărabile*). Dat fiind un şir infinit de mulţimi măsurabile şi disjuncte două câte două $\{A_k \subset \mathbb{R}^3\}_{k\geq 1}$, pentru care mulţimea $A = \bigcup_{k\geq 1} A_k$ este mărginită, atunci A este măsurabilă şi

$$\mu(A) = \mu\left(\bigcup_{k\geq 1} A_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu(A_k).$$

In ce priveşte măsurabilitatea mulţimilor nemărginite din "spaţiul ambiant" $\mathbb{R}^3$, se formulează

Definiţia 3.4. O mulţime nemărginită $A \subset \mathbb{R}^3$ este măsurabilă dacă pentru orice $\rho \in \mathbb{N}^*$ mulţimea mărginită $A_\rho = \{x \in A \mid \|x\| < \rho\}$ este măsurabilă, $\lim \mu(A_\rho)$ există, iar atunci măsura mulţimii A se defineşte prin relaţia

$$\mu(A) = \lim_{\rho \to \infty} \mu(A_\rho).$$

O clasă particulară de mulţimi măsurabile deosebit de importantă, deoarece permite formularea aşa numitei "valabilităţi aproape peste tot (în

$\mathbb{R}^3$)" a unei proprietăţi, este clasa mulţimilor (mărginite sau nemărginite) de măsură nulă.

Definiţia 3.5. Mulţimea mărginită şi măsurabilă $A \subset \mathbb{R}^3$ se numeşte de măsură nulă (în $\mathbb{R}^3$) dacă $\mu(A)=0$.

Definiţia 3.6. Mulţimea nemărginită şi măsurabilă $A \subset \mathbb{R}^3$ se numeşte de măsură nulă (în $\mathbb{R}^3$) dacă $\mu(A_\rho)=0$ pentru orice $\rho \in \mathbb{N}^*$.

Definiţia 3.7. Spunem că o anumită proprietate are loc aproape peste tot în $\mathbb{R}^3$ (sau într-un domeniu $D \subset \mathbb{R}^3$) dacă mulţimea punctelor din $\mathbb{R}^3$ (sau din domeniul $D \subset \mathbb{R}^3$) în care proprietatea nu are loc este de măsură nulă.

Definiţia 3.8. O funcţie $f: A \to \mathbb{R}$, unde A este o mulţime mărginită şi mărurabilă în $\mathbb{R}^3$, se numeşte funcţie măsurabilă pe A, dacă submulţimea $\{x \in A \mid f(x) > a\}$ este măsurabilă pentru orice $a \in \mathbb{R}$.

Această definiţie se generalizează imediat la cazul funcţiilor măsurabile pe $\mathbb{R}^3$, adică

Definiţia 3.9. O funcţie $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ se numeşte măsurabilă pe $\mathbb{R}^3$ (sau simplu, măsurabilă) dacă mulţimea $\{x \in \mathbb{R}^3 \mid f(x) > a\}$ este măsurabilă pentru orice $a \in \mathbb{R}$.

Din definiţia 3.9 rezultă direct

Propoziţia 3.5. Dacă funcţiile reale f, g sunt măsurabile pe $\mathbb{R}^3$, atunci şi funcţiile $f+g, fg, f/g$ (cu $g \neq 0$), $\max\{f,g\}, \min\{f,g\}, |f|, |g|$ sunt măsurabile pe $\mathbb{R}^3$.

Propoziţia 3.6. Dacă $\{f_n\}_{n \geq 0}, f_n: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ este un şir de funcţii măsurabile, atunci funcţiile

(i) $\bar{f}=\sup_{n\geq 0} f_n$

(ii) $\underline{f}=\inf_{n\geq 0} f_n$

(iii) $\lim inf f_n = \sup_{m\geq 0}\inf_{n\geq m} f_n$

(iv) $\lim sup f_n = \inf_{m\geq 0}\sup_{n\geq m} f_n$

sunt de asemenea măsurabile.

Demonstraţia măsurabilităţii funcţiei $\bar{f}$ are în vedere că pentru orice $a\in\mathbb{R}$, $\{x\in\mathbb{R}^3 \mid \bar{f}(x)>a\} = \bigcup_{m\geq 0}\{x\in\mathbb{R}^3 \mid f_m(x)>a\}$, iar orice reuniune numărabilă de mulţimi măsurabile este o mulţime măsurabilă. Pentru (ii) observăm că $\underline{f}=\inf_{n\geq 0} f_n = -\sup_{n\geq 0}(-f_n)$ şi deci f este măsurabilă, iar (iii) şi (iv) decurg din (i) şi (ii). (q.e.d.)

Propoziţia 3.7. O funcţie $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$ care coincide aproape peste tot cu limita unui şir $\{f_n\}_{n\geq 0}$, aproape peste tot convergent, de funcţii măsurabile, $f_n:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$, este măsurabilă pe $\mathbb{R}^3$.

Funcţia caracteristică

$$\chi_1(x)=\begin{cases} 1\,, & x\in A \\ 0\,, & x\notin A \end{cases}$$

a unei mulţimi măsurabile $A\subset\mathbb{R}^3$ reprezintă unul dintre cele mai simple exemple de funcţii măsurabile.

Definiţia 3.10. Funcţia măsurabilă pe $\mathbb{R}^3$

$$s(x)=\sum_{i=1}^{n} a_i\chi_{A_i}(x)\,,$$

care ia numai un număr finit n de valori distincte $\{a_1,...,a_n\}\subset[0,\infty)$ pe

BCU IAŞI - CENTRUL UNIVERSITY LIBRARY

mulţimile $\{A_i=\{x \mid s(x)=a_i\}\}_{i=\overline{1,n}}$ din $\mathbb{R}^3$, se numeşte funcţie simplă.

Teorema 3.7. Dacă $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+$ este o funcţie măsurabilă pe $\mathbb{R}^3$, atunci există un şir nedescrescător $\{s_n(x)\}_{n\geq 1}$ de funcţii simple pe $\mathbb{R}^3$, convergent la $f(x)$ în orice punct $x\in\mathbb{R}^3$.

Demonstraţie. Pentru fiecare $n\in\mathbb{N}^*$ şi $k=1,2,...,n2^n$ definim mulţimile:

$$A_{nk}=f^{-1}\left(\left[\frac{k-1}{2^n},\frac{k}{2^n}\right]\right) \text{ şi } B_n=f^{-1}([n,\infty)),$$

care sunt măsurabile deoarece funcţia f este măsurabilă. In acord cu relaţia de definiţie 3.10 a unei funcţii simple, construim şirul nedescrescător de funcţii simple $s_n(x):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$ date de expresia

$$s_n(x)=\sum_{k=1}^{n2^n}\frac{k-1}{2^n}\chi_{A_{nk}}(x)+n\chi_{B_n}(x),$$

din care se observă că în toate punctele $x\in\mathbb{R}^3$, pentru care $f(x)<\infty$, avem $f(x)\leq s_n(x)+2^{-n}$, iar în punctele $x\in\mathbb{R}^3$, pentru care $f(x)=\infty$, avem $s_n(x)=n$, ceea ce arată că $\lim_{n\to\infty}s_n(x)=f(x)$ [11]. (q.e.d.)

Definiţia 3.11. Se numeşte integrala Lebesgue pe mulţimea măsurabilă $A\subset\mathbb{R}^3$ a funcţiei simple $s=\sum_{i=1}^{n}a_i\chi_{A_i}$ numărul real nenegativ

$$\int_A s(x)d^3x=\sum_{i=1}^{n}a_i\mu(A_i\cap A),$$

unde se utilizează convenţia "ad-hoc" $0\cdot\infty=0$.

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Propoziţia 3.8. (expresia integrală a măsurii Lebesgue). Pentru orice $A \subset \mathbb{R}^3$ mărginită şi măsurabilă, este adevărată relaţia

$$\mu(A) = \int_A d^3x .$$

Demonstraţie. Fie $A \subset \mathbb{R}^3$ o mulţime mărginită şi măsurabilă. Considerând, în definiţia 3.11, drept funcţie simplă chiar funcţia caracteristică $\chi_A(x)$ a mulţimii A, obţinem

$$\int_{\mathbb{R}^3} \chi_A d^3x = \int_A d^3x = \mu(A \cap \mathbb{R}^3) = \mu(A). \text{ (q.e.d.)}$$

Propoziţia 3.9. Dacă A_j şi A sunt două mulţimi măsurabile în $\mathbb{R}^3$ şi $A_j \cap A \neq \varnothing$, atunci

$$\int_A \chi_{A_j} d^3x = \mu(A_j \cap A).$$

Demonstraţie. Fie funcţia simplă pe $\mathbb{R}^3$: $s(x) = \sum_{i=1}^{n} \delta_{ji} \chi_{A_i}$. Atunci, conform definiţiei 3.11, avem

$$\int_A s(x) d^3x = \sum_{i=1}^{n} \delta_{ji} \mu(A_i \cap A) = \mu(A_j \cap A),$$

adică

$$\int_A s(x) d^3x = \int_A \left(\sum_{i=1}^{n} \delta_{ji} \chi_{A_i} \right) d^3x = \int_A \chi_{A_j} d^3x = \mu(A_j \cap A).$$

(q.e.d.)

Propoziţia 3.10. Fie $A \subset \mathbb{R}^3$ o mulţime măsurabilă şi $s(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \chi_{A_i}$ o funcţie simplă (măsurabilă) pe $\mathbb{R}^3$. Atunci, are loc relaţia

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\int_A \sum_{i=1}^{n} a_i \chi_{A_i} d^3x = \sum_{i=1}^{n} a_i \int_A \chi_{A_i} d^3x .$$

Demonstraţie. Din definiţia 3.11 şi propoziţia 3.9, avem

$$\int_A s(x) d^3x = \int_A \sum_{i=1}^{n} a_i \chi_{A_i} d^3x = \sum_{i=1}^{n} a_i \mu(A_i \cap A) = \sum_{i=1}^{n} a_i \int_A \chi_{A_i} d^3x .$$

(q.e.d.)

Cu ajutorul acestor două propoziţii vom demonstra

Teorema 3.8. (a linearităţii integralei Lebesgue pe mulţimea funcţiilor simple). Fie α şi β două constante reale, $M \subset \mathbb{R}^3$ o mulţime măsurabilă şi

$$s_1(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i \chi_{A_i}(x) \ , \ s_2(x) = \sum_{k=1}^{m} b_k \chi_{B_k}(x)$$

două funcţii simple oarecare pe $\mathbb{R}^3$. Atunci

$$\int_M \left(\alpha s_1(x) + \beta s_2(x)\right) d^3x = \alpha \int_M s_1(x) d^3x + \beta \int_M s_2(x) d^3x .$$

Demonstraţie.

$$\int_M \left[\alpha s_1(x) + \beta s_2(x)\right] d^3x = \int_M \left[\sum_{i=1}^{n} \alpha a_i \chi_{A_i}(x) + \sum_{k=1}^{m} \beta b_k \chi_{B_k}(x)\right] d^3x =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \alpha a_i \int_M \chi_{A_i} d^3x + \sum_{k=1}^{m} \beta b_k \int_M \chi_{B_k} d^3x,$$

adică, în acord cu propoziţia 3.9,

$$\int_M \left[\alpha s_1(x) + \beta s_2(x)\right] d^3x = \sum_{i=1}^{n} \alpha a_i \mu(A_i \cap M) + \sum_{k=1}^{m} \beta b_k \mu(B_k \cap M) =$$

$$= \alpha \sum_{i=1}^{n} a_i \mu(A_i \cap M) + \beta \sum_{k=1}^{m} b_k \mu(b_k \cap M),$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ceea ce înseamnă, conform definiţiei 3.11,

$$\int_M [\alpha s_1(x) + \beta s_2(x)] d^3x = \alpha \int_M s_1(x) d^3x + \beta \int_M s_2(x) d^3x .$$

Evident, rezultatul acestei teorema se păstrează şi în cazul $M = \mathbb{R}^3$.

Definiţia 3.12. Se numeşte integrala Lebesgue a funcţiei mărginite, măsurabilă şi nenegativă, $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$ pe mulţimea mărginită şi măsurabilă $M \subset \mathbb{R}^3$, numărul real nenegativ

$$\int_M f(x) d^3x = sup \int_M s(x) d^3x ,$$

unde marginea superioară este evaluată în raport cu toate funcţiile simple (măsurabile) cu proprietatea $0 \le s(x) \le f(x)$ pe $\mathbb{R}^3$.

Un rezultat deosebit de important în stabilirea integrabilităţii Lebesgue a unei funcţii măsurabile nenegative $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$ este oferit de

Teorema 3.9. (a convergenţei monotone). Dacă $\{f_n\}_{n \ge 0}$ este un şir nedescrescător de funcţii măsurabile nenegative $f_n: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}_+ \cup \{0\}$, convergent punctual la funcţia f pe $\mathbb{R}^3$, atunci

$$\lim_{n \to \infty} \int_{\mathbb{R}^3} f_n(x) d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} \lim_{n \to \infty} f_n(x) d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} f(x) d^3x .$$

Demonstraţia acestei teoreme este clar şi detaliat prezentată în lucrarea [62].

Definiţia 3.13. Dacă $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}_+$ este o funcţie mărginită şi pozitivă, pentru care

$$\lim_{\rho \to \infty} \int_{B_\rho} f(x) d^3x < \infty$$

(unde B_ρ este bila închisă, de rază ρ, centrată în origine), atunci f se numeşte integrabilă pe $\mathbb{R}^3$, iar

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(x)\,d^3x = \lim_{\rho\to\infty}\left\{\int_{B_\rho\subset\mathbb{R}^3} f(x)\,d^3x\right\}$$

reprezintă integrala Lebesgue improprie a funcţiei f pe spaţiul $\mathbb{R}^3$.

Pentru integrabilitatea funcţiilor măsurabile, pozitive şi care nu sunt mărginite peste tot în $\mathbb{R}^3$, se formulează [62]

Definiţia 3.14. Dată fiind o funcţie $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+$, măsurabilă, pozitivă şi nu neapărat mărginită, vom considera pentru orice $\alpha\in\mathbb{R}_+$ funcţia măsurabilă, mărginită şi pozitivă $f_\alpha:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+$ definită prin $f_\alpha(x)=\min\{f(x),\alpha\}$. Dacă

$$\lim_{\alpha\to\infty}\int_{\mathbb{R}^3} f_\alpha(x)\,d^3x<\infty$$

atunci vom spune că funcţia f este integrabilă pe $\mathbb{R}^3$, iar

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(x)\,d^3x = \lim_{\alpha\to\infty}\left\{\int_{\mathbb{R}^3} f_\alpha(x)\,d^3x\right\}$$

reprezintă integrala Lebesgue improprie a funcţiei f pe spaţiul $\mathbb{R}^3$.

Extinderea noţiunii de integrală Lebesgue la cazul funcţiilor măsurabile cu valori reale $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$, se realizează simplu, prin luarea în considerare a funcţiilor măsurabile nenegative

$f^+:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$, $f^-:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$ definite prin:

$$f^+(x)=\max\{f(x),0\}$$

$$f^-(x)=\max\{-f(x),0\},$$

cu ajutorul cărora funcţia $f(x)$ şi modulul ei se exprimă prin relaţiile:

$$f(x)=f^+(x)-f^-(x)$$

$$|f(x)|=f^+(x)+f^-(x).$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 3.15. Funcţia măsurabilă $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$ este Lebesgue integrabilă pe mulţimea măsurabilă $M\subset\mathbb{R}^3$, dacă funcţiile măsurabile nenegative f^+, f^- sunt Lebesgue integrabile pe $M\subset\mathbb{R}^3$ (în sensul definiţiilor 3.12, 3.13, 3.14) şi în acest caz numărul real

$$\int_M f(x)\,d^3x = \int_M f^+(x)\,d^3x - \int_M f^-(x)\,d^3x$$

se numeşte integrala Lebesgue (improprie) a funcţiei f pe mulţimea $M\subset\mathbb{R}^3$.

Definiţia 3.16. Funcţia complexă măsurabilă $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este Lebesgue integrabilă pe mulţimea măsurabilă $M\subset\mathbb{R}^3$, dacă funcţiile reale măsurabile $Re[\Phi(x)]$ şi $Im[\Phi(x)]$ sunt Lebesgue integrabile pe $M\subset\mathbb{R}^3$ (în sensul definiţiei 3.15) şi, în acest caz, numărul complex

$$\int_M \phi(x)\,d^3x = \int_M Re[\phi(x)]\,d^3x + i\int_M Im[\phi(x)]\,d^3x$$

se numeşte integrala Lebesgue (improprie) a funcţiei complexe ϕ pe mulţimea $M\subset\mathbb{R}^3$.

Cele mai importante proprietăţi ale integralei Lebesgue sunt sintetizate în următoarea teoremă, pe care, din motive de "spaţiu topografic", o enunţăm fără demonstraţie, dar recomandăm cititorului interesat de aceasta lucrările de specialitate [37], [51] şi [62].

Teorema 3.10. Fie $M\subset\mathbb{R}^3$ o mulţime măsurabilă:

(i) Dacă $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este o funcţie complexă măsurabilă iar M este de măsură nulă, atunci ϕ este integrabilă pe M şi în plus

$$\int_M \phi(x)\,d^3x \equiv 0.$$

(proporietatea de anulare a integralei Legesgue pe mulţimi de măsură nulă)

(ii) Dacă M este mărginită şi Q este o altă mulţime mărginită şi

măsurabilă în $\mathbb{R}^3$ iar $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este integrabilă, atunci

$$\int_{M\cup Q}\phi(x)d^3x = \int_M\phi(x)d^3x+\int_Q\phi(x)d^3x-\int_{M\cap Q}\phi(x)d^3x.$$

(iii) Dacă $\mu(M\cap Q)=0$ atunci rezultă din (ii) şi (i) proprietatea de "aditivitate" pe domenii a integralei Lebesgue, adică

$$\int_{M\cup Q}\phi(x)d^3x = \int_M\phi(x)d^3x+\int_Q\phi(x)d^3x.$$

(iv) Dacă funcţia complexă integrabilă ϕ este egală aproape peste tot cu funcţia complexă $\Psi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$, atunci Ψ este integrabilă pe M şi în plus

$$\int_M\phi(x)d^3x = \int_M\Psi(x)d^3x.$$

(v) Dacă M este mărginită, iar $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este integrabilă pe M, atunci

$$\left|\int_M\phi(x)d^3x\right| \le \sup_M|\phi(x)|\cdot\mu(M).$$

(vi) Fie $f:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$ o funcţie măsurabilă nenegativă, iar $g:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$ o funcţie integrabilă pe M. Dacă $f\le g$ aproape peste tot în M, atunci f este integrabilă în M şi în plus

$$0\le\int_M f(x)d^3x \le \int_M g(x)d^3x$$

(acest punct al teoremei exprimă atât criteriul de integrabilitate "prin comparaţie" cât şi proprietatea de monotonie a integralei Lebesgue)

(vii) Dacă $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este o funcţie complexă măsurabilă pe M iar $g:\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}_+\cup\{0\}$ este o funcţie măsurabilă şi integrabilă pe M, cu proprietatea că $|\phi(x)|\le g(x)$ aproape peste tot în M, atunci ϕ este de asemenea integrabilă (pe M) şi în plus

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\left|\int_M \phi(x)d^3x\right| \le \int_M |\phi(x)|d^3x \le \int_M g(x)d^3x$$

(viii) Dacă $a,b\in\mathbb{C}$ iar $\Psi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ şi $\phi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ sunt două funcţii complexe integrabile pe M, atunci funcţia $(a\Psi+b\phi):\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ este de asemenea integrabilă pe M şi în plus

$$\int_M (a\Psi(x)+b\phi(x))d^3x = a\int_M \Psi(x)d^3x + b\int_M \phi(x)d^3x$$

(proprietatea de liniaritate a integralei Lebesgue).

Pe baza acestor noţiuni şi rezultate din teoria integralei Lebesgue, să trecem acum la subiectul propriu-zis al paragrafului de faţă, anume la studiul spaţiului $L^2(D)$ al funcţiilor complexe de variabile reale pătratic integrabile (în sens Lebesgue) pe mulţimea măsurabilă $D\subseteq\mathbb{R}^3$ şi a structurării sale ca spaţiu Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$.

Definiţia 3.17. Funcţia complexă $\psi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$, măsurabilă şi definită aproape peste tot pe mulţimea măsurabilă $D\subseteq\mathbb{R}^3$, se numeşte pătratic integrabilă (în sens Lebesgue) pe D, dacă funcţia $|\psi(x)|^2=(\psi^*(x)\psi(x)):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}-\mathbb{R}_-$ este integrabilă pe D (în sensul definiţiei 3.12, sau al definiţiilor 3.13, 3.14), adică există în $\mathbb{R}_+$

$$\int_D |\psi(x)|^2 d^3x < \infty.$$

Evident, dacă funcţia pătratic integrabilă $\psi(x)$ nu este definită peste tot în D, atunci o putem prelungi în toate punctele mulţimii D, prin condiţia $\psi(x)=0$ în acele puncte din D în care nu era definită iniţial.

Teorema 3.11. Funcţiile complexe $\psi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$, $\varphi:\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$, măsurabile pe D, sunt egale aproape peste tot în D, dacă şi numai dacă

$$\int_D |\psi(x)-\varphi(x)|^2 d^3x = 0.$$

Demonstraţie. Dacă $\phi=\varphi$ aproape peste tot în D, atunci funcţia măsurabilă şi nenegativă $f(x)=|\psi(x)-\varphi(x)|^2$ va fi pozitivă numai pe o mulţime $A\subset D$ de măsură nulă, adică $\mu(A)=0$. Considerând $D=(D-A)\cup A$, obţinem din punctele (iii) şi (i) ale teoremei 3.10

$$\int_D f(x)d^3x = \int_{D-A} f(x)d^3x + \int_A f(x)d^3x = 0 + \int_A f(x)d^3x = 0,$$

deoarece $\mu(A)=0$. Invers, dacă integrala Lebesgue a funcţiei $f(x)=|\psi(x)-\varphi(x)|^2$ pe mulţimea măsurabilă D este zero, atunci, dacă $f(x)$ nu este zero peste tot în D (ceea ce ar însemna $\psi=\varphi$ peste tot în D), să considerăm mulţimile $A_n=\left\{x \mid f(x)>\frac{1}{n^2}\right\}\cap D$ "construite" pentru orice $n\in N^*$ şi funcţiile simple $s_n(x)=\frac{1}{n^2}\chi_{A_n}(x)<f(x)$ şi să aplicăm proprietatea de monotonie a integralei Lebesgue, punctul (vi)-teorema 3.10. Avem

$$0\le\int_D s_n(x)d^3x = \frac{1}{n^2}\mu(A_n\cap D) =$$
$$= \frac{1}{n^2}\mu(A_n) \le \int_D f(x)d^3x = 0,$$

de unde rezultă imediat că $\mu(A_n)=0$ pentru orice $n\in N^*$ şi astfel mulţimea $\{x \mid f(x)>0\}=A$ va avea măsura

$$\mu(A)=\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty}A_n\right)\le\sum_{n=1}^{\infty}\mu(A_n)=0,$$

adică $\psi(x)=\varphi(x)$ aproape peste tot în D. (q.e.d.)

Teorema 3.12. Mulţimea $L^2(D)$ a tuturor funcţiilor complexe pătratic integrabile pe D este un spaţiu liniar complex în raport cu operaţiile:

(i) $(\psi+\varphi)(x) = \psi(x)+\varphi(x)$, $(\forall)\ \psi(x), \varphi(x) \in L^2(D)$

(ii) $(a\psi)(x) = a\psi(x)$, $(\forall)\ a \in \mathbb{C},\ \psi \in L^2(D)$.

Demonstraţie. Din relaţiile

$$|\psi+\varphi|^2 = |\psi|^2 + |\varphi|^2 + (\psi^*\varphi + \varphi^*\psi)$$

$$|\psi-\varphi|^2 = |\psi|^2 + |\varphi|^2 - (\psi^*\varphi + \varphi^*\psi)$$

rezultă prin adunare membru cu membru

$$|\psi+\varphi|^2 = 2\left[|\psi|^2 + |\varphi|^2\right] - |\psi-\varphi|^2,$$

adică

$$0 \le |\psi+\varphi|^2 \le 2\left[|\psi|^2 + |\varphi|^2\right]$$

şi, din rezultatul (vi) al teoremei 3.10 şi definiţia 3.17, obţinem că funcţia $(\psi+\varphi)(x) = \psi(x)+\varphi(x) : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ este din $L^2(D)$. Pentru (ii) demonstraţia este imediată deoarece

$$\int_D |(a\psi)(x)|^2\, d^3x = \int_D |a|^2 \cdot |\psi(x)|^2\, d^3x = |a|^2 \int_D |\psi(x)|^2 d^3x < \infty,$$

deci $(a\psi)(x) = a\psi(x) : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ este de asemenea din $L^2(D)$. Odată stabilit faptul că operaţiile (i)-(ii) invariază mulţimea $L^2(D)$, verificarea axiomelor I şi II, de la definiţia 2.1 se face fără nici un fel de dificultăţi şi, bineînţeles, vectorul zero al spaţiului liniar $L^2(D)$ este funcţia $\psi(x) \equiv 0$.

Prin aplicarea teoremelor 3.11 şi 3.12 se demonstrează imediat

Teorema 3.13. Clasele de echivalenţă (notate simplu) ψ ale funcţiilor $\psi(x) \in L^2(D)$, în care două funcţii aparţin aceleiaşi clase dacă sunt egale aproape peste tot în D, formează un spaţiu liniar, notat $\mathfrak{L}^2(D)$.

Observaţie. Vectorul zero în $\mathfrak{L}^2(D)$ este clasa funcţiilor din $L^2(D)$ egale aproape peste tot în D cu funcţia identic nulă.

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

O primă condiţie necesară structurării spaţiului $\mathcal{L}^2(D)$ ca un spaţiu Hilbert este îndeplinită prin utilizarea rezultatului oferit de

Teorema 3.14. Aplicaţia $(.,.): \mathcal{L}^2(D) \times \mathcal{L}^2(D) \to \mathbb{C}$, dată de expresia

$$(\psi, \varphi) = \int_D \psi^*(x)\, \varphi(x)\, d^3x,$$

defineşte un produs scalar, astfel încât $\mathcal{L}^2(D)$ devine un spaţiu euclidian, iar aplicaţia $\|\cdot\|: \mathcal{L}^2(D) \to \mathbb{R}_+$ dată de expresia

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)} = \left[\int_D |\psi(x)|^2 d^3x\right]^{1/2}$$

este o normă euclidiană pe $\mathcal{L}^2(D)$, deci acesta devine prehilbertian.

Demonstraţie. Dacă arătăm că operaţia $(.,.): \mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2(D) \to \mathbb{C}$ este un produs scalar, atunci caracterul de normă euclidiană al aplicaţiei $\|\cdot\|: \mathcal{L}^2(D) \to \mathbb{C}$ decurge direct din teorema 2.21 demonstrată în paragraful anterior, adică, altfel spus, dacă spaţiul liniar complex $\mathcal{L}^2(D)$ este un spaţiu euclidian în raport cu aplicaţia $(.,.)$ atunci el devine "automat" un spaţiu prehilbertian. Axioma I de la definiţia 2.14 se verifică imediat dat fiind că, prin definiţie (ne referim la definiţia 3.12 şi 3.17),

$$(\psi, \psi) = \int_D \psi^*(x)\psi(x)\, d^3x = \int_D |\psi(x)|^2 d^3x \geq 0,$$

iar egalitatea cu zero implică, în acord cu teorema 3.11, $\psi(x) = 0$ aproape peste tot în D, ceea ce înseamnă, conform teoremei 3.13, $\psi = 0$, unde 0 aparţine clasei de echivalenţă $\{0\}$. Axiomele II şi III sunt evident satisfăcute, având în vedere teoremele 3.13, 3.12 şi proprietatea de liniaritate a integralei Lebesgue (punctul (viii)-teorema 3.10), adică

$$(\psi, a\varphi) = \int_D \psi^*(x)[a\,\varphi(x)]\,d^3x =$$

$$= a\int_D \psi^*(x)\,\varphi(x)\,d^3x = a(\psi,\varphi)$$

$$(\psi+\varphi,\chi) = \int_D [\psi^*(x)+\varphi^*(x)]\,\chi(x)\,d^3x =$$

$$= \int \psi^*(x)\,\chi(x)\,d^3x + \int \varphi^*(x)\,\chi(x)\,d^3x = (\psi,\chi)+(\varphi,\chi),$$

iar axioma IV de la definiţia 2.14 este şi ea îndeplinită deoarece

$$(\psi,\varphi) = \int_D \psi^*(x)\varphi(x)\,d^3x =$$

$$= \int_D [\psi(x)\,\varphi^*(x)]^*\,d^3x = \left\{\int_D \varphi^*(x)\psi(x)\,d^3x\right\}^* = (\varphi,\psi)^*$$

(q.e.d.)

Definiţia 3.18. Sirul de funcţii $\{\psi_n(x) \in L^2(D)\}_{n\geq 1}$ se numeşte fundamental în medie dacă pentru orice $\varepsilon > 0$ există $N(\varepsilon) > 0$ astfel încât

$$\int_D |\psi_m(x) - \psi_n(x)|^2\,d^3x < \varepsilon$$

pentru oricare $m, n > N(\varepsilon)$.

Definiţia 3.19. Sirul de funcţii $\{\psi_n(x) \in L^2(D)\}_{n\geq 1}$ este convergent în medie la funcţia $\psi(x) \in L^2(D)$ dacă

$$\lim_{n\to\infty} \int_D |\psi(x) - \psi_n(x)|^2\,d^3x = 0,$$

şi indicăm aceasta prin notaţia *l.i.m.* a limitei în medie, adică

$$\psi(x) = \underset{n\to\infty}{l.i.m.}\ \psi_n(x).$$

Din definiţiile 3.18, 3.19 şi teorema 3.14 rezultă echivalenţa şirului

fundamental în medie $\left\{\psi_n(x) \in L^2(D)\right\}_{n\geq 1}$ cu şirul Cauchy $\left\{\psi_n \in \mathcal{L}^2(D)\right\}_{n\geq 1}$ şi echivalenţa convergenţei în medie pe $L^2(D)$ cu convergenţa în normă pe $\mathcal{L}^2(D)$.

In fine, pasul decisiv în stabilirea caracterului hilbertian al spaţiului $\mathcal{L}^2(D)$ a fost făcut de către Riesz şi Fischer [51], atunci când au demonstrat

Teorema 3.15. Dacă un şir $\left\{\psi_n(x) \in L^2(D)\right\}_{n\geq 1}$ este fundamental în medie, atunci converge în medie la o funcţie $\psi(x)$ din $L^2(D)$.

Cu alte cuvinte, având în vedere echivalenţele menţionate anterior, are loc

Teorema 3.15'. Spaţiul prehilbertian $\mathcal{L}^2(D)$ este complet, deci este un spaţiu Hilbert.

Demonstraţiile acestor teoreme, fiind deosebit de laborioase, nu le mai reproducem aici şi tot din aceleaşi motive enunţăm, fără demonmstraţie, încă o teoremă fundamentală în dezvoltarea formalismului Schrödinger al Mecanicii Cuantice [27], anume

Teorema 3.16. Spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$ este separabil.

Ca o consecinţă deosebit de importantă, în studiul soluţiilor $\Psi(\vec{x},t)$ din $\mathcal{L}^2(D)$ ale Ecuaţiei de Evoluţie (IV.6.18), rezultă (din teoremele 3.16 şi 2.30) că spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$ are baze ortonormale numărabile şi deci, de dimensiune numărabilă.

BCU IASI / CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

V.4. Elemente de Teoria Operatorilor Liniari în Spaţii Hilbert

După ce în paragrafele V.2 şi V.3 ne-am concentrat asupra spaţiilor funcţionale euclidiene, speciale şi fundamentale, utilizate în Mecanica Cuantică, anume, în general, spaţiul Hilbert E şi în particular spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$, în cuprinsul acestui paragraf vom trece în revistă noţiunile, relaţiile şi proprietăţile "primare" din cadrul teoriei generale a operatorilor liniari în (sau pe) spaţii Hilbert, care stau, aşa cum ne-au sugerat-o deja rezultatele prezentate în capitolul IV şi paragraful V.1, la baza dezvoltării formalismului Schrödinger al Mecanicii Ondulatorii.

La un mod destul de general, un operator este o aplicaţie între două spaţii de funcţii. In cele ce urmează, vom nota orice operator cu o literă mare din alfabetul latin, accentuată cu circomflex şi vom identifica cele două spaţii de funcţii (în care acţionează şi respectiv în care ia valori operatorul) cu un spaţiu Hilbert E, adică vom considera cazul operatorilor $\hat{A}:E\to E$. La aspectele matematice legate de domeniul de definiţie $E(\hat{A})\subseteq E$ al unui operator $\hat{A}$ şi respectiv, la domeniul său de valori $R(\hat{A}) = \hat{A}(E(\hat{A}))\subseteq E$, ne vom referi ceva mai târziu (tot în cadrul acestui paragraf), atunci când vom defini operatorul adjunct $\hat{A}^+$ al unui operator $\hat{A}$.

Să începem cu o serie de proprietăţi "de origine topologică" pe care le pot avea operatorii în spaţii normate.

Definiţia 4.1. Un operator $\hat{A}:E\to E$ se numeşte operator mărginit, dacă transformă orice submulţime mărginită din E într-o submulţime mărginită în E, adică, dacă există o constantă pozitivă $C\in\mathbb{R}_+$ astfel încât

(4.1) $\quad \|\hat{A}\psi\|\le C\|\psi\|,$

oricare ar fi $\psi\in E$.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 4.2. Se numeşte norma operatorului $\hat{A}$ şi se notează cu $\|\hat{A}\|$, numărul real nenegativ

$$\|\hat{A}\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|\hat{A}\psi\|}{\|\psi\|} \quad , \psi \in E. \tag{4.2}$$

Evident, operatorul $\hat{A}$ este mărginit dacă şi numai dacă $\|\hat{A}\| < \infty$.

Definiţia 4.3. Un operator $\hat{A}: E \to E$ este continuu dacă din convergenţa şirului $\{\psi_n \in E\}$ rezultă că şi şirul $\{\hat{A}\psi_n \in E\}$ este convergent.

Definiţia 4.4. Un operator $\hat{A}$ este compact dacă pentru orice şir mărginit $\{\psi_n\}$ există un subşir convergent al lui $\{\hat{A}\psi_n\}$ adică, dacă transformă orice submulţime mărginită din E într-o submulţime compactă în E.

Definiţia 4.5. Un operator $\hat{A}$ se numeşte complet continuu dacă este continuu şi compact.

Am ţinut să amintim aceste definiţii deoarece, prin combinarea proprietăţilor cuprinse în acestea cu proprietăţile de liniaritate şi hermiticitate (de fapt, în special cu proprietatea de autoadjunctivitate) a operatorilor asociaţi (în Mecanica Cuantică) mărimilor observabile, se obţin o serie de rezultate deosebit de profunde în modelarea şi descrierea matematică a proceselor cuantice.

Definiţia 4.6. Suma $\hat{A}+\hat{B}$ şi produsul $\hat{A}\hat{B}$, al operatorilor $\hat{A},\hat{B}$ definiţi pe E cu valori în E, sunt date de relaţiile:

$$\text{a)} \quad (\hat{A}+\hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad , (\forall)\psi \in E$$

$$\text{b)} \quad (\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) \quad , (\forall)\psi \in E. \tag{4.3}$$

Teorema 4.1. Mulţimea $\Omega = \{\hat{A}: E \to E\}$, împreună cu operaţia de sumare $\hat{A}+\hat{B}$, a oricăror doi operatori $\hat{A},\hat{B} \in \Omega$, formează un grup abelian.

Demonstraţie. Deoarece elementele mulţimii Ω sunt operatori definiţi

pe E cu valori în E, este clar că operaţia de sumare introdusă prin definiţia 4.6 este o operaţie internă aditivă şi, de asemenea, este evident că ea satisface axioma de asociativitate. Elementul neutru al structurii algebrice $(\Omega,+)$ este operatorul nul

(4.4) $\hat{0}\psi = 0$

oricare ar fi $\psi \in E$ deoarece, în acord cu definiţia 4.6, avem

$$(\hat{A}+\hat{0})\psi = \hat{A}\psi + \hat{0}\psi = \hat{A}\psi, (\forall)\ \psi \in E$$

$$(\hat{0}+\hat{A})\psi = \hat{0}\psi + \hat{A}\psi = \hat{A}\psi, (\forall)\ \psi \in E$$

adică $\hat{A}+\hat{0}=\hat{0}+\hat{A}=\hat{A}$ pentru orice $\hat{A}\in\Omega$. Elementul simetric (invers) al operatorului $\hat{A}\in\Omega$ este operatorul $-\hat{A}$ deoarece

$$(\hat{A}+(-\hat{A}))\psi = \hat{A}\psi - \hat{A}\psi = 0 = \hat{0}\psi,\ (\forall)\ \psi \in E$$

$$((-\hat{A})+\hat{A})\psi = -\hat{A}\psi + \hat{A}\psi = 0 = \hat{0}\psi,\ (\forall)\ \psi \in E$$

adică $\hat{A}+(-\hat{A})=(-\hat{A})+\hat{A}=\hat{0}$ pentru orice $\hat{A}\in\Omega$. In fine, axioma de comutativitate $\hat{A}+\hat{B}=\hat{B}+\hat{A}$ este evident satisfăcută dat fiind că structura algebrică $(E,+)$ este grup abelian. (q.e.d.)

Teorema 4.2. Mulţimea Ω a tuturor operatorilor definiţi pe E cu valori în E, împreună cu operaţia de sumare, ca operaţie internă aditivă, şi cu operaţia de înmulţire cu scalari din corpul K, peste care E este spaţiu liniar, dată de

(4.5) $(a\hat{A})\psi = a(\hat{A}\psi) = a\hat{A}\psi \leftrightarrow (a\hat{A}) = a\hat{A},\ (\forall)a\in K, \psi\in E, \hat{A}\in\Omega$

(considerată ca operaţie externă multiplicativă) formează un spaţiu liniar.

Demonstraţie este imediată având în vedere teorema 4.1, definiţia operaţiei de înmulţire cu scalari şi axiomele din definiţia 2.1 a unui spaţiu liniar L.

Teorema 4.3. Mulţimea $\Omega=\{\hat{A}:E\to E\}$, împreună cu operaţia de produs $\hat{A}\cdot\hat{B}$, a oricăror doi operatori $\hat{A},\hat{B}\in\Omega$, formează un semigrup cu element unitate (sau identitate).

Demonstraţie. Trebuie să arătăm că operaţia de înmulţire, în sensul definiţiei 4.6, a operatorilor Ω este internă şi asociativă. Că este internă decurge imediat din faptul că $\hat{B}\psi\in E$, $(\forall)\,\psi\in E$ şi deci $\hat{A}(\hat{B}\psi)\in E$, pentru orice ψ din E, şi astfel $(\hat{A}\hat{B})=\hat{A}\hat{B}$ este un operator din Ω. Asociativitatea se demonstrează asemănător, deoarece

$$\left(\left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C}\right)\psi=\left(\hat{A}\hat{B}\right)\left(\hat{C}\psi\right)=\hat{A}\left(\hat{B}\left(\hat{C}\psi\right)\right)=\hat{A}\left(\left(\hat{B}\hat{C}\right)\psi\right)=\left(\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right)\right)\psi\ ,\ (\forall)\ \psi\in E,$$

adică $(\hat{A}\hat{B})\hat{C}=\hat{A}(\hat{B}\hat{C})$ oricare ar fi operatorii $\hat{A},\hat{B},\hat{C}\in\Omega$. Elementul identitate este reprezentat de elementul neutru faţă de operaţia de înmulţire a doi operatori din Ω, adică de operatorul identitate

$$\hat{1}\psi=\psi\ ,\ (\forall)\,\psi\in E. \tag{4.6}$$

In adevăr,

$$(\hat{A}\hat{1})\psi=\hat{A}(\hat{1}\psi)=\hat{A}\psi\ ;\ (\hat{1}\hat{A})\psi=\hat{1}(\hat{A}\psi)=\hat{A}\psi\ ,\ (\forall)\ \psi\in E$$

şi deci $\hat{A}\hat{1}=\hat{1}\hat{A}=\hat{A}$, oricare ar fi operatorul $\hat{A}\in\Omega$. (q.e.d.)

Teorema 4.4. Fie E un spaţiu Hilbert şi $\hat{A},\hat{B}$ doi operatori din Ω care verifică identic ecuaţia

$$(\psi,\hat{A}\varphi)=(\psi,\hat{B}\varphi)$$

oricare ar fi vectorii $\psi,\varphi\in E$. Atunci,

$$\hat{A}=\hat{B}.$$

Demonstraţie. Din ecuaţia

$$(\psi,\hat{A}\varphi)=(\psi,\hat{B}\varphi),$$

rezultă

$$(\psi,\hat{A}\varphi)-(\psi,\hat{B}\varphi)=(\psi,\hat{A}\varphi)+(\psi,-\hat{B}\varphi)=$$

$$=\left(\psi,(\hat{A}+(-\hat{B}))\varphi\right)=0,$$

adică

$$\left(\psi,(\hat{A}-\hat{B})\varphi\right)=0.$$

Cum ψ este arbitrar (în E), rezultă că vectorul $(\hat{A}-\hat{B})\varphi$ este ortogonal pe spaţiul Hilbert E şi deci, în mod obligatoriu,

$$(\hat{A}-\hat{B})\varphi=0 \quad \leftrightarrow \quad \hat{A}\varphi=\hat{B}\varphi,$$

pentru orice $\varphi\in E$, ceea ce înseamnă că $\hat{A}=\hat{B}$. (q.e.d.)

Propoziţia 4.1. Spaţiul liniar $\Omega(+,\cdot)$ de la teorema 4.2, împreună cu operaţia internă multiplicativă de produs a operatorilor din Ω (de la definiţia 4.6, sau teorema 4.3), nu formează (încă) o algebră, cu element identitate, $\Omega(E;K)$ de operatori în spaţiul (Hilbert) E peste corpul K.

Demonstraţia este deosebit de simplă, deoarece axioma de distributivitate la stânga a înmulţirii (operatorilor din Ω) faţă de adunare

$$\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})=\hat{C}\hat{A}+\hat{C}\hat{B}$$

şi axioma de asociativitate a înmulţirii cu scalari din K

$$a(\hat{A}\hat{B})=(a\hat{A})\hat{B}=\hat{A}(a\hat{B}),$$

nu sunt satisfăcute în general, adică oricare ar fi operatorii $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ definiţi pe E cu valori în E. In adevăr, pentru ca distributivitatea la stânga a înmulţirii faţă de adunare să fie satisfăcută, ar trebui ca pentru orice $\psi\in E$

$$\left(\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})\right)\psi=\hat{C}\left((\hat{A}+\hat{B})\psi\right)=\hat{C}(\hat{A}\psi+\hat{B}\psi)$$

să fie egal cu

$$\left((\hat{C}\hat{A})+(\hat{C}\hat{B})\right)\psi=(\hat{C}\hat{A})\psi+(\hat{C}\hat{B})\psi=\hat{C}(\hat{A}\psi)+\hat{C}(\hat{B}\psi),$$

adică, notând $\hat{A}\psi=\varphi_1$ şi $\hat{B}\psi=\varphi_2$, ar trebui ca operatorii din Ω ($\hat{C}$ este oarecare), să aibă proprietatea de aditivitate

(4.7) $\hat{C}(\varphi_1+\varphi_2)=\hat{C}\varphi_1+\hat{C}\varphi_2$, $(\forall)\ \hat{C}\in\Omega$, $(\forall)\,\varphi_1,\varphi_2\in E$.

In mod analog, pentru ca proprietatea de asociativitate la înmulţirea cu scalari să fie satisfăcută, ar trebui ca pentru orice $\psi\in E$ şi $a\in\mathrm{K}$ să avem

$$((a\hat{A})\hat{B})\psi=a\hat{A}(\hat{B}\psi)=(\hat{A}(a\hat{A}))\psi=\hat{A}(a\hat{B}\psi)$$

adică, notând $\hat{B}\psi=\varphi$, ar trebui ca operatorii din Ω, ($\hat{A}$ este oarecare), să aibă proprietatea de omogenitate

(4.8) $\hat{A}(a\varphi)=a\hat{A}(\varphi)$, $(\forall)\ \hat{A}\in\Omega$, $a\in\mathrm{K}$, $\varphi\in E$.

Din punctul de vedere al propoziţiei 4.1, "introducerea algebrică" a operatorilor liniari pe (sau, mai restrictiv, în) spaţii Hilbert este un exemplu frumos şi natural de acţiune a legii negării negaţiei, deoarece aceasta conduce la

Definiţia 4.7. Un operator $\hat{A}:E\to E$ se numeşte operator liniar pe spaţiul Hilbert E dacă este aditiv şi omogen adică, dacă verifică axiomele:

(4.9)
a) $\hat{A}(\psi+\varphi)=\hat{A}\psi+\hat{A}\varphi$

b) $\hat{A}(a\psi)=a\hat{A}\psi$

pentru orice $a\in\mathrm{K}$ şi $\psi,\varphi\in E$.

Din definiţia 4.7 decurge aproape direct

Teorema 4.5. Condiţia necesară şi suficientă pentru ca operatorul $\hat{A}:E\to E$ să fie liniar este ca

(4.10) $\hat{A}(a\psi+b\varphi)=a\hat{A}\psi+b\hat{A}\varphi$,

oricare ar fi $\psi,\varphi\in E$ şi $a,b\in\mathrm{K}$.

Demonstraţie. Condiţia este necesară deoarece, dacă $\hat{A}$ este liniar, atunci

$$\hat{A}(a\psi+b\varphi)=\hat{A}(a\psi)+\hat{A}(b\varphi)=a\hat{A}\psi+b\hat{A}\varphi.$$

Condiţia este şi suficientă deoarece, pentru $a=b=1$ obţinem aditivitatea

operatorului $\hat{A}$, iar pentru $b=0$ obţinem omogenitatea sa. (q.e.d.)

Referitor la mărginirea şi continuitatea operatorilor liniari pe spaţii Hilbert, avem

Teorema 4.6. Pentru orice operator liniar $\hat{A}:E\to E$ condiţiile de operator continuu şi operator mărginit sunt echivalente.

Demonstraţie. Fie $\hat{A}$ mărginit şi $\{\psi_n\}$ din E un şir convergent la $\psi\in E$. Atunci, conform definiţiei 4.1,

$$\|\hat{A}\psi_n-\hat{A}\psi\|=\|\hat{A}(\psi_n-\psi)\|\le C\,\|\psi_n-\psi\|$$

adică şi şirul $\{\hat{A}\psi_n\}$ din E este convergent la $\hat{A}\psi$ din E. Invers, să presupunem că $\hat{A}$ este continuu în sensul definiţiei 4.2. Atunci, există $\delta>0$ astfel încât $\|\varphi\|<\delta$ să implice $\|\hat{A}\varphi\|\le 1$. Fie $\psi\in E$ cu $\psi\neq 0$ şi $0<\delta'<\delta$. Vectorul $\varphi=\delta'\|\psi\|^{-1}\cdot\psi$ satisface evident condiţia $\|\varphi\|=\delta'<\delta$ deoarece $\delta'<\delta$ şi atunci, din

$$\|\hat{A}\psi\|=\frac{\|\psi\|}{\delta'}\|\hat{A}\varphi\| \text{ şi } \|\hat{A}\varphi\|\le 1,$$

rezultă inegalitatea

$$\|\hat{A}\psi\|\le\frac{\|\psi\|}{\delta'}=C\|\psi\|$$

pentru orice $\psi\neq 0$ din E. In cazul $\psi=0$, avem

$$\hat{A}0=\hat{A}(0\psi)=0\hat{A}\psi\equiv 0$$

deci condiţia de mărginire a operatorului liniar $\hat{A}$ este identic satisfăcută şi pentru $\psi=0\in E$.

(q.e.d.)

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 4.7. Fie $\Omega(E)$ mulţimea tuturor operatorilor liniari definiţi pe E cu valori în E. Operatorul sumă şi operatorul produs al oricăror doi operatori (liniari) din $\Omega(E)$ sunt, la rândul lor, operatori liniari deci aparţin lui $\Omega(E)$.

Demonstraţie. Fie $\hat{A},\hat{B}$ doi operatori (liniari) din $\Omega(E)$, a şi b doi scalari oarecare din K şi ψ,φ doi vectori arbitrari din E. Atunci,

$$(\hat{A}+\hat{B})(a\psi+b\varphi)=\hat{A}(a\psi+b\varphi)+\hat{B}(a\psi+b\varphi),$$

adică

$$(\hat{A}+\hat{B})(a\psi+b\varphi)=a(\hat{A}\psi+B\psi)+b(\hat{A}\varphi+\hat{B}\varphi)$$

şi deci,

$$(\hat{A}+\hat{B})(a\psi+b\varphi)=a(\hat{A}+\hat{B})\psi+b(\hat{A}+\hat{B})\varphi,$$

oricare ar fi $\hat{A},\hat{B}\in\Omega(E)$, $a,b\in$K şi $\psi,\varphi\in E$. Pentru produsul $\hat{A}\hat{B}$ avem

$$(\hat{A}\hat{B})(a\psi+b\varphi)=\hat{A}\big(\hat{B}(a\psi+b\varphi)\big)=\hat{A}(a\hat{B}\psi+b\hat{B}\varphi),$$

adică

$$(\hat{A}\hat{B})(a\psi+b\varphi)=a\hat{A}(\hat{B}\psi)+b\hat{A}(\hat{B}\varphi)$$

şi deci

$$\hat{A}\hat{B}(a\psi+b\varphi)=a(\hat{A}\hat{B})\psi+b(\hat{A}\hat{B})\varphi,$$

oricare ar fi $\hat{A},\hat{B}\in\Omega(E)$, $a,b\in$K , $\psi,\varphi\in E$. (q.e.d.).

Cu alte cuvinte, din teorema 4.7 rezultă că suma şi produsul operatorilor din $\Omega(E)$ sunt operaţii interne (aditivă şi respectiv multiplicativă) relative la mulţimea $\Omega(E)$. In aceste condiţii, se pot demonstra imediat următoarele teoreme analoage teoremelor 4.1-4.3.

Teorema 4.8. Structura algebrică $(\Omega(E),+)$ este un grup abelian.

Teorema 4.9. Mulţimea $\Omega(E)$ este un spaţiu liniar relativ la operaţiile de sumare a doi operatori din $\Omega(E)$ şi de înmulţire (a acestora) cu scalari din K.

BCU IASI - CENTRUL UNIVERSITAR

Teorema 4.10. Mulţimea $\Omega(E)$, împreună cu operaţia de produs a oricăror doi operatori din $\Omega(E)$, este un semigrup cu identitate.

Spre deosebire de mulţimea Ω şi în plus faţă de rezultatele teoremelor 4.1-4.3 şi 4.8-4.10, submulţimea $\Omega(E)$ "introduce" următoarele două rezultate importante în calculele cu operatori liniari pe (sau, mai restrictiv, în) spaţii Hilbert sau, mai general, pe spaţii liniare.

Teorema 4.11. Mulţimea $\Omega(E)$, împreună cu operaţiile (interne) de sumare şi de produs ale elementelor sale, formează un inel cu element identitate.

Demonstraţie. Că $\Omega(E)$ este grup faţă de adunare şi semigrup (cu identitate) faţă de înmulţire, ştim din teoremele 4.8 şi 4.10. Mai avem de demonstrat distributivitatea la dreapta şi la stânga faţă de adunare a operaţiei de înmulţire a elementelor lui $\Omega(E)$. Fie $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ trei operatori oarecare din $\Omega(E)$ şi ψ un vector oarecare din E. Pentru distributivitatea la dreapta faţă de adunare, avem

$$(\hat{A}+\hat{B})\hat{C}\psi = (\hat{A}+\hat{B})(\hat{C}\psi) = \hat{A}(\hat{C}\psi) + \hat{B}(\hat{C}\psi),$$

adică

$$(\hat{A}+\hat{B})\hat{C}\psi = (\hat{A}\hat{C}) + (\hat{B}\hat{C})\psi$$

şi deci

$$(\hat{A}+\hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C} \tag{4.11}$$

este verificată. Observăm că, în acest caz, proprietatea de liniaritate a celor trei operatori nu a jucat nici un rol. In schimb, în cazul verificării distributivităţii la stânga faţă de adunare, liniaritatea operatorilor din $\Omega(E)$ este esenţială. In adevăr,

$$\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})\psi = \hat{C}(\hat{A}\psi + \hat{B}\psi) = \hat{C}(\hat{A}\psi) + \hat{C}(\hat{B}\psi)$$

adică

$$\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})\psi = (\hat{C}\hat{A}) + (\hat{C}\hat{B})\psi$$

şi deci

(4.12) $\hat{C}(\hat{A}+\hat{B}) = \hat{C}\hat{A}+\hat{C}\hat{B}$. (q.e.d.)

Teorema 4.12. Mulţimea $\Omega(E)$ a tuturor operatorilor liniari pe spaţiul Hilbert E este o algebră asociativă liniar-complexă cu identitate faţă de operaţiile interne de sumare şi produs a operatorilor din $\Omega(E)$ şi faţă de operaţia externă de înmulţire cu scalari din $\mathbb{C}$ a operatorilor liniari pe spaţiul Hilbert E peste corpul $\mathbb{C}$.

Demonstraţia decurge imediat din teorema 4.9 şi 4.11.

Pentru a da o formulare suficient de generală şi în acelaşi timp riguroasă operatorului adjunct $\hat{A}^+$ al unui operator $\hat{A}$ trebuie să renumţăm la condiţia ca operatorul $\hat{A}$ să fie definit pe întregul spaţiu Hilbert E adică, trebuie să ne referim la operatori (liniari) $\hat{A}$ ce acţionează în E.

Definiţia 4.8. Un operator $\hat{A}$ într-un spaţiu Hilbert E este o aplicaţie liniară a unui subspaţiu liniar $E(\hat{A})$ al lui E în E. Submulţimea $E(\hat{A}) \subset E$ se numeşte domeniul de definiţie a operatorului $\hat{A}$, iar imaginea sa sub acţiunea lui $\hat{A}$, adică $R(\hat{A}) = \{\hat{A}\psi \mid \psi \in E(\hat{A})\} = \hat{A}(E(\hat{A}))$, se numeşte domeniul de valori ale operatorului $\hat{A}$.

Definiţia 4.9. Un operator liniar $\hat{A}$ definit pe $E(\hat{A}) \supset E(\hat{A})$ care coincide cu operatorul $\hat{A}$ pe $E(\hat{A})$ se numeşte o extensie a lui $\hat{A}$ la $E(\hat{A})$ şi se notează prin $\hat{A} \subset \hat{A}$.

In legătură cu proprietăţile extensiilor operatorilor liniari şi mărginiţi în spaţiul Hilbert E, există următorul rezultat foarte important, numit "principiul de extensiune".

Teorema 4.13. Orice operator liniar şi mărginit $\hat{A}$, al cărui domeniu de definiţie $E(\hat{A})$ este dens în E şi satisface $\overline{E}(\hat{A}) = E$, are o extensie $\hat{A}$

liniară, continuă şi unică la întregul spaţiu E.

Demonstraţie. Deoarece $\overline{E(\hat{A})} = E$, rezultă că pentru un vector oarecare $\psi \in E$ există un şir $\{\psi_n \in E(\hat{A})\}$ convergent la ψ. Cum $\hat{A}$ este mărginit, rezultă că

$$\|\hat{A}\psi_n - \hat{A}\psi_m\| \leq C \|\psi_n - \psi_m\|,$$

adică şirul $\{\hat{A}\psi_n\}$ este un şir Cauchy în E şi, deoarece E este spaţiu Hilbert, este şi convergent în E. Prin urmare, alegând pentru fiecare $\psi \in E$ un şir $\{\psi_n \in E(\hat{A})\}$, cu proprietatea $\lim_{n\to\infty} \|\psi - \psi_n\| = 0$, putem defini un operator $\underline{\hat{A}}$, cu $E(\underline{\hat{A}}) = E$ ca limita în norma lui E a şirului $\{\hat{A}\psi_n\}$, adică

$$\lim_{n\to\infty} \| \underline{\hat{A}}\psi - \hat{A}\psi_n \| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \underline{\hat{A}}\psi = l.i.m_{n\to\infty} \hat{A}\psi_n .$$

Liniaritatea extensiei $\underline{\hat{A}}$ decurge imediat din definiţia acţiunii sale, fiindcă pentru $\psi = l.i.m._{n\to\infty} \psi_n$ şi $\varphi = l.i.m._{n\to\infty} \varphi_n$, unde $(\forall)\, \psi_n, \varphi_n \in E(\hat{A})$, avem

$$\underline{\hat{A}}(a\psi + b\varphi) = l.i.m._{n\to\infty} \hat{A}(a\psi_n + b\varphi_n) = l.i.m._{n\to\infty} \left[a\hat{A}\psi_n + b\hat{A}\varphi_n\right]$$

adică

(4.13) $$\|\underline{\hat{A}}\psi\| \leq \|\underline{\hat{A}}\psi - \hat{A}\psi_n\| + C\|\psi_n\|$$

şi pentru $n\to\infty$, cum $\lim_{n\to\infty} \|\psi - \psi_n\| = 0$ şi $\lim_{n\to\infty} \|\underline{\hat{A}}\psi - A\psi_n\| = 0$, obţinem că operatorul liniar $\underline{\hat{A}}$ de extensie a lui $\hat{A}$ pe E este mărginit. Unicitatea extensiei lui $\hat{A}$ este evidentă din însăşi raţionamentele care au stat la baza acestei demonstraţii. (q.e.d.)

O altă proprietate pe care o pot avea operatorii liniari într-un spaţiu Hilbert şi care cel mai adesea, în aplicaţii, joacă un rol deloc neglijabil, este proprietatea de "închidere" menţionată în

BUCUREŞTI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 4.10. Un operator liniar $\hat{A}$ într-un spaţiu Hilbert E este un operator închis dacă pentru şirul $\{\psi_n \in E(\hat{A})\}$, convergent în norma lui E la $\psi \in E$, şi şirul $\{(\hat{A}\psi_n) \in E\}$ este convergent în norma lui E la $\varphi \in E$, şi este adevărat că $\psi \in E(\hat{A})$ şi $\varphi = \hat{A}\psi$.

Deşi această definiţie are în vedere operatori liniari în spaţii Hilbert, dorim să amintim (a se vedea de exemplu lucrarea [12]) că, prin intermediul definiţiei graficului unui operator, proprietatea de închidere se poate enunţa într-o formă mai generală, corespunzătoare operatorilor (nu neaparat liniari) între două spaţii liniare topologice.

Definiţia 4.11. Dacă L', L'' sunt două spaţii liniare iar $\hat{A}: L'(\hat{A}) \subset L' \to R(\hat{A}) \subset L''$ este un operator între acestea, atunci submulţimea $\Gamma(\hat{A}) = \{(\psi; \hat{A}\psi) \mid \psi \in L'(\hat{A})\} \subset L' x L''$ se numeşte graficul operatorului $\hat{A}$.

Definiţia 4.12. Dacă L' şi L'' sunt două spaţii liniare topologice, iar $\hat{A}$ definit pe $L'(\hat{A}) \subset L'$ este un operator între acestea, se spune că $\hat{A}$ este închis dacă graficul său $\Gamma(\hat{A})$ este o submulţime închisă în $L' x L''$.

Teorema 4.14. Orice operator liniar şi închis $\hat{A}$ definit pe un întreg spaţiu Banach $L'_c(\|\cdot\|)$ cu valori într-un alt spaţiu Banach $L''_c(\|\cdot\|)$, este un operator continuu (adică este şi mărginit).

Demonstraţia acestei teoreme este prezentată în [12] într-o manieră elegantă, bazată pe acţiunea operatorului liniar continuu

(4.14) $\Pi((\psi; \hat{A}\psi)) = \psi$

de "proiecţie" biunivocă a mulţimii $\Gamma(\hat{A})$ pe $L'_c(\|\cdot\|)$.

Corolar 4.1. Orice operator liniar închis definit pe un spaţiu Hilbert este un operator mărginit.

Referitor la acest corolar, atragem atenţia cititorului puţin mai "grăbit" (cu lectura) că impunerea condiţiei ca domeniul de definiţie al operatorului să

fie întregul spaţiu Hilbert (sau Banach) este esenţială deoarece altfel, când domeniul de definiţie nu este întregul spaţiu, există operatori liniari şi închişi care sunt nemărginiţi.

După aceste elemente pregătitoare, de care ne vom folosi în continuare, să trecem acum la definirea adjunctului unui operator şi la studiul câtorva dintre proprietăţile sale. In primul rând, dacă ne limităm doar la clasa operatorilor liniari continui (deci mărginiţi) pe un spaţiu Hilbert E, atunci, cu ajutorul următorului rezultat important din teoria funcţionalelor liniare pe spaţii Hilbert, cunoscut sub numele de "teorema lui Riesz" [51], se poate demonstra teorema 4.16 care practic va defini (după cum vom vedea) operatorul adjunct al oricărui operator (liniar) mărginit pe spaţiul Hilbert E.

Teorema 4.15 (dată de Riesz). Fiecărei funcţionale liniar-continue $F: E \to \mathbb{C}$ (definită pe un spaţiu Hilbert E peste corpul complex $\mathbb{C}$) îi corespunde în mod unic un element φ din E astfel încât

(4.15) $F(\psi) = (\varphi, \psi)$ şi $\|F\| = \|\varphi\|$

pentru orice ψ din E.

Teorema 4.16. Dacă $\hat{A}$ este un operator liniar continuu pe întreg spaţiul Hilbert E cu valori în E, atunci există un operator liniar continuu $\hat{A}^+$, având ca domeniu de definiţie $E(\hat{A}^+)$ întregul spaţiu E şi luând valori în E, astfel încât au loc relaţiile:

(4.16)
a) $(\hat{A}^+\psi, \varphi) = (\psi, \hat{A}\varphi)$, $(\forall)\ \psi, \varphi \in E$,

b) $\|\hat{A}^+\| = \|\hat{A}\|$.

Demonstraţie. Existenţa operatorului $\hat{A}^+$ (asociat lui $\hat{A}$), care verifică prima relaţie din concluzia teoremei, precum şi faptul că $E(\hat{A}^+) = E$, se demonstrează prin intermediul aplicării teoremei lui Riesz 4.15. Faptul că $\hat{A}^+ \in \Omega(E)$ decurge imediat din relaţiile:

$$\left(\hat{A}^{+}(a\psi+b\varphi),\chi\right)=\left(a\psi+b\varphi,\hat{A}\chi\right)=$$

$$=a^{*}\left(\psi,\hat{A}\chi\right)+b^{*}\left(\varphi,\hat{A}\chi\right)=a^{*}\left(\hat{A}^{+}\psi,\chi\right)+b^{*}\left(\hat{A}^{+}\varphi,\chi\right)$$

adică

$$\left(\hat{A}^{+}(a\psi+b\varphi),\chi\right)=\left((a\hat{A}^{+}\psi+b\hat{A}^{+}\varphi),\chi\right)$$

şi deci, cum $a,b\in\mathrm{K}$ şi $\psi,\varphi,\chi\in E$ sunt oarecare, rezultă în baza teoremei 4.5 că operatorul $\hat{A}^{+}$ este într-adevăr liniar. Demonstraţia celei de a doua relaţii a teoremei face apel la inegalitatea Cauchy-Schwarz-Buniakowski (2.16.e) din teorema 2.16 şi la proprietatea operatorului $\hat{A}$ de a fi mărginit (deoarece este liniar şi continuu). Avem deci

$$(4.17)\quad \left|\left(\hat{A}^{+}\psi,\varphi\right)\right|=\left|\left(\psi,\hat{A}\varphi\right)\right|\leq\|\psi\|\cdot\|\hat{A}\varphi\|\leq\|\hat{A}\|\cdot\|\psi\|\cdot\|\varphi\|$$

şi luând $\varphi=\hat{A}^{+}\psi$, obţinem

$$(4.18)\quad \|\hat{A}^{+}\psi\|\leq\|\hat{A}\|\cdot\|\psi\|,$$

adică $\hat{A}^{+}$ este mărginit (şi deci continuu fiindcă este şi liniar), iar $\|\hat{A}^{+}\|\leq\|\hat{A}\|$. Inversând în relaţiile de mai sus (4.17) şi (4.18) rolul operatorilor $\hat{A},\hat{A}^{+}$, rezultă evident $\|\hat{A}\|\leq\|\hat{A}^{+}\|$, ceea ce înseamnă de fapt că $\|\hat{A}^{+}\|=\|\hat{A}\|$. (q.e.d.)

Definiţia 4.13. Operatorul mărginit $\hat{A}^{+}\in\Omega(E)$, asociat prin relaţia (4.16.a) operatorului <u>mărginit</u> $\hat{A}\in\Omega(E)$, se numeşte <u>operatorul adjunct</u> al operatorului $\hat{A}$, sau pe scurt, <u>adjunctul</u> lui $\hat{A}$.

Teorema 4.17. Oricare ar fi operatorii <u>mărginiţi</u> $\hat{A},\hat{B}$ aparţinând lui $\Omega(E)$ peste corpul K şi pentru orice $a\in\mathrm{K}$, au loc relaţiile:

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$
(4.19)\qquad
\begin{aligned}
&\text{a)} && (\hat{A}^{+})^{+}=\hat{A}\\
&\text{b)} && (a\hat{A})^{+}=a^{*}\hat{A}^{+}\\
&\text{c)} && (\hat{A}+\hat{B})^{+}=\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}\\
&\text{d)} && (\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}\\
&\text{e)} && \|\hat{A}^{+}\hat{A}\|=\|\hat{A}\|^{2}.
\end{aligned}
$$

Demonstraţie. Pentru (4.19.a) avem, oricare ar fi $\psi,\varphi\in E$,

$$\left((\hat{A}^{+})^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\psi,\hat{A}^{+}\varphi\right)=\left(\hat{A}^{+}\varphi,\psi\right)^{*}=\left(\varphi,\hat{A}\psi\right)^{+}=(\hat{A}\psi,\varphi),$$

adică $(\hat{A}^{+})^{+}=\hat{A}$. Pentru (4.19.b), în mod analog, se poate scrie

$$\left((a\hat{A})^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\psi,a\hat{A}\varphi\right)=a(\psi,\hat{A}\varphi)=$$

$$=a\left(\hat{A}^{+}\psi,\varphi\right)=\left(a^{*}\hat{A}^{+}\psi,\varphi\right),$$

adică $(a\hat{A})^{+}=a^{*}\hat{A}^{+}$. Proprietatea (4.19.c) rezultă imediat din

$$\left((\hat{A}+\hat{B})^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\psi,(\hat{A}+\hat{B})\varphi\right)=$$

$$=(\psi,\hat{A}\varphi+\hat{B}\varphi)=(\psi,\hat{A}\varphi)+(\psi,\hat{A}\varphi)$$

şi deci

$$\left((\hat{A}+\hat{B})^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\hat{A}^{+}\psi,\varphi\right)+\left(\hat{B}^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\hat{A}^{+}\psi+\hat{B}^{+}\psi,\varphi\right),$$

ceea ce înseamnă evident $(\hat{A}+\hat{B})^{+}=\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}$. In cazul relaţiei (4.19.d) avem

$$\left((\hat{A}\hat{B})^{+}\psi,\varphi\right)=\left(\psi,(\hat{A}\hat{B})\varphi\right)=$$

$$=\left(\psi,\hat{A}(\hat{B}\varphi)\right)=\left(\hat{A}^{+}\psi,\hat{B}\varphi\right)=\left(\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}\psi,\varphi\right),$$

adică $(\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$. In sfârşit, pentru a demonstra relaţia (4.19.e), pornim de la expresia normei lui $\hat{A}\psi$

$$\|\hat{A}\psi\|^{2}=(\hat{A}\psi,\hat{A}\psi)=\left|\left(\hat{A}^{+}(\hat{A}\psi),\psi\right)\right|\le\|\hat{A}^{+}(\hat{A}\psi)\|\cdot\|\psi\|\le\|\hat{A}^{+}\hat{A}\|\cdot\|\psi\|^{2}$$

ceea ce înseamnă că

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(4.20) $\|\hat{A}\|^2 \le \|\hat{A}^+\hat{A}\|$.

Dar, pentru $\|\hat{A}^+\hat{A}\|$ avem inegalitatea

$$\|\hat{A}^+\hat{A}\| \le \|\hat{A}^+\| \cdot \|\hat{A}\|,$$

care înseamnă, dat fiind că $\|\hat{A}^+\| = \|\hat{A}\|$ (teorema 4.16.b),

(4.21) $\|\hat{A}^+A\| \le \|\hat{A}\|^2$

astfel încât, din (4.21) şi (4.20), obţinem egalitatea (4.19.e).

(q.e.d.)

Până acum, în cadrul teoremelor 4.16, 4.17 şi a definiţiei 4.13, ne-am referit la operatorii adjuncţi operatorilor mărginiţi din algebra $\Omega(E)$ a tuturor operatorilor liniari definiţi pe întregul spaţiu Hilbert E şi cu valori în E. Condiţia de mărginire este esenţială deoarece, chiar dacă operatorii liniari utilizaţi nu ar fi fost definiţi pe tot spaţiul E, ei ar putea fi extinşi, în baza teoremei 4.13 (principiul de extensiune), la operatori liniari continui pe tot spaţiul E, asigurând astfel consistenţa teoremei 4.16, a definiţiei 4.13 şi a operaţiilor menţionate şi efectuate în teorema 4.17. Această observaţie este importantă deoarece, în cazurile mai generale, corespunzătoare de exemplu operatorilor liniari nemărginiţi definiţi într-un spaţiu Hilbert, consistenţa definiţiei 4.13 (şi a celorlalte două teoreme) nu mai este "ab initio" asigurată, dat fiind faptul că existenţa adjunctului unui operator nu mai este de la sine înţeleasă, şi trebuie (cu necesitate) să apelăm la

Teorema 4.10. Fie E un spaţiu Hilbert şi $\hat{A}$ un operator cu valori în E definit pe $E(\hat{A}) \subset E$. Operatorul $\hat{A}^+$ care verifică relaţia

(4.22) $(\hat{A}^+\psi, \varphi) = (\psi, \hat{A}\varphi)$

pentru orice $\varphi \in E(\hat{A})$ şi $\psi \in E(\hat{A}^+)$ se numeşte adjunctul lui $\hat{A}$, este liniar şi există dacă şi numai dacă domeniul de definiţie $E(\hat{A})$ al lui $\hat{A}$ este dens în spaţiul Hilbert E.

Demonstraţia acestei teoreme fiind destul de laborioasă, nu o mai

reproducem aici; pentru detalii, recomandăm cititorului lucrarea [1].

Definiţia 4.14. Doi operatori $\hat{A},\hat{B}$ în spaţiul Hilbert E, având domeniile de definiţie $E(\hat{A})$ şi respectiv $E(\hat{B})$, se numesc reciproc adjuncţi (adjuncţi unul altuia) dacă relaţia

(4.23) $(\hat{B}\psi,\varphi)=(\psi,\hat{A}\varphi)$

este verificată oricare ar fi $\varphi\in E(\hat{A})$ şi $\psi\in E(\hat{B})$.

Cu ajutorul acestei definiţii şi a teoremei 4.18 se poate demonstra cu relativă uşurinţă

Teorema 4.19. Dacă adjunctul $\hat{A}^+$ al operatorului $\hat{A}$ există, atunci $E(\hat{A})\subseteq E(\hat{A}^+)$ şi de asemenea dacă $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ sunt reciproc adjuncţi, atunci, în mod necesar, $\hat{A}^+$ este o extensie a operatorului $\hat{B}$, adică $\hat{A}^+$ este extensia maximală a tuturor operatorilor reciproc adjuncţi cu $\hat{A}$.

O proprietate generală a adjuncţilor operatorilor liniari într-un spaţiu Hilbert este stabilită de

Teorema 4.20. Operatorul adjunct $\hat{A}^+$ (dacă există) al operatorului liniar $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E este un operator închis.

Demonstraţie. Să considerăm în $E(\hat{A}^+)$ şirul convergent $\{\varphi_n\}$ la elementul $\varphi\in E$ şi să presupunem că şirul $\{\hat{A}^+\varphi_n\in E\}$ este convergent la un vector $\chi\in E$. Atunci, pentru orice $\psi\in E$ avem

$$(\chi,\psi)=\lim_{n\to\infty}\left(\hat{A}^+\varphi_n,\psi\right)=\lim_{n\to\infty}\left(\varphi_n,\hat{A}\psi\right)=(\varphi,\hat{A}\psi),$$

ceea ce implică, prin însăşi definiţia lui $\hat{A}^+$ (din teorema 4.18), că $\varphi\in E(\hat{A}^+)$ şi $\chi=\hat{A}^+\varphi$, adică, în acord cu definiţia 4.10, $\hat{A}^+$ este închis. (q.e.d.)

Din această teoremă şi din corolarul 4.1 obţinem imediat

Teorema 4.21. Adjunctul $\hat{A}^+$ al unui operator liniar $\hat{A}$ definit pe întregul spaţiu Hilbert, adică $E(\hat{A})=E$, este un operator mărginit, având ca domeniu de definiţie tot spaţiul E, adică $E(A^+)=E$.

Demonstraţie. Faptul că $E(\hat{A}^+)=E$ decurge imediat din $E(\hat{A})=E$ şi teorema 4.19 şi astfel, rezultă că $\hat{A}^+$ este liniar şi închis (în baza teoremei 4.20) pe întregul spaţiu E, adică, aplicând teorema 4.14 (sau corolarul 4.1), este liniar continuu pe E (şi deci, mărginit). (q.e.d.)

Referitor la operatorul adjunct al unui operator liniar şi închis în spaţiul Hilbert E şi la adjunctul acestui operator se poate demonstra (lucru pe care noi nu-l vom face, având în vedere demersul destul de laborios).

Teorema 4.22. Dacă există operatorul adjunct $\hat{A}^+$ al operatorului liniar şi închis $\hat{A}:E(\hat{A})\subset E\to E$, atunci $E(\hat{A}^+)$ este dens în E şi $\hat{A}^{++}=\hat{A}$.

In cazul mai general decât cel specificat în teorema anterioară, şi anume când operatorul liniar $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E are o extensie liniară închisă, are loc următoarea teoremă cu importante consecinţe "practice"

Teorema 4.23. Domeniul de definiţie $E(\hat{A}^+)$ al operatorului adjunct operatorului liniar $\hat{A}:E(\hat{A})\subset E\to E$ este dens în E dacă şi numai dacă $\hat{A}$ are o extensie liniară şi închisă. In această situaţie, $\hat{A}^{++}$ este cea mai mică extensie liniară şi închisă a operatorului $\hat{A}$.

Demonstraţie. Dacă operatorul liniar $\hat{A}$ este el însuşi închis, atunci această teoremă este chiar teorema 4.22. De aceea, în demonstrarea implicaţiei "$\hat{A}$ posedă extensie liniară închisă $\Rightarrow$ $E(\hat{A}^+)$ dens în E" se va avea în vedere că graficul $\Gamma(\hat{A})$ al extensiei liniar-închise a lui $\hat{A}^+$ este o submulţime închisă în $E\oplus E$, conţinând graficul $\Gamma(\hat{A})$ al operatorului liniar $\hat{A}$

şi se va aplica teorema 4.22, rezultând în acest fel şi faptul că $\Gamma(\hat{A}^{++}) \subset \Gamma(\hat{A})$, adică $\hat{A}^{++} \subseteq \hat{A}$, deci că $\hat{A}^{++}$ este cea mai mică extensie liniară şi închisă a lui $\hat{A}$. Pentru demonstrarea implicaţiei inverse, se are în vedere că $E(\hat{A}^{+})$ fiind densă E, atunci, în acord cu teorema 4.18, $\hat{A}^{++}$ există, iar din relaţia $(\hat{A}^{+}\psi, \varphi) = (\psi, \hat{A}\varphi)$, pentru $\psi \in E(\hat{A}^{+})$, rezultă în mod evident că $\hat{A}^{++}$ este o extensie liniar închisă (teorema 4.20) a operatorului $\hat{A}$. (q.e.d.)

In încheierea acestui paragraf să ne referim puţin, dar semnificativ, la una din cele mai incomode proprietăţi ale operatorilor liniari nemărginiţi în spaţiul Hilbert şi anume, la proprietatea dată de

Teorema 4.24. Intr-un spaţiu Hilbert E nici un operator liniar nemărginit $\hat{A}$ nu poate avea $E(\hat{A}) = E$ şi nici nu admite o extensie liniară $\hat{A}$ cu proprietatea $E(\hat{A}) = E$.

Demonstraţie. Dacă operatorul liniar nemărginit $\hat{A}^{+}$ ar fi definit pe tot spaţiul Hilbert, adică $E(\hat{A}) = E$, atunci, cum E este dens în E, ar reprezenta din teorema 4.18 că $\hat{A}^{+}$ există şi are domeniul de definiţie $E(\hat{A}^{+}) = E$; dar atunci, având în vedere că din teorema 4.20 $\hat{A}^{+}$ este închis, ar rezulta, conform teoremei 4.14 (sau, conform corolarului 4.1), că $\hat{A}^{+}$ este mărginit pe E ceea ce ar însemna că $\hat{A}$ este mărginit, fiind astfel contrazisă ipoteza. In mod analog rezultă că, dacă operatorul liniar nemărginit $\hat{A}$ ar admite extensia $\hat{A}$ definită pe întregul spaţiu, atunci din nou $\hat{A}$ ar fi mărginit pe E şi deci am ajunge la concluzia că extensia liniară $\hat{A}$ a operatorului nemărginit $\hat{A}$ este mărginită, ceea ce este fals în mod evident.

Din această teoremă rezultă clar atât necesitatea definiţiei 4.8, în care, spre deosebire de definiţia 4.7, se face o referire explicită la domeniul de

definiţie $E(\hat{A}) \subset E$ al operatorului liniar $\hat{A}$, cât şi faptul că studiul general al operatorilor liniari nemărginiţi ridică probleme mult mai dificile decât cele prezentate în studiul operatorilor liniari mărginiţi. Este suficient în acest sens să ne referim numai la faptul că operaţiile algebrice fundamentale, suma şi produsul a doi operatori liniari nemărginiţi $\hat{A}, \hat{B}$ pot fi definite, prin relaţiile (4.3), numai dacă $E(\hat{A}) \cap E(\hat{B}) \neq \varnothing$ în cazul sumei (4.3.a) şi respectiv, în cazul produsului (4.3.b), numai dacă $R(\hat{B}) \subseteq E(\hat{A})$ ori de câte ori $\hat{A}\hat{B}$ acţionează pe $E(\hat{B})$.

In sfârşit, dar nu în ultimul rând, pentru ceea ce va urma în paragraful pe care tocmai ne pregătim să-l abordăm, ca de altfel şi pentru aproape tot formalismul Mecanicii Cuantice, este deosebit de importantă.

Definiţia 4.15. Dacă $\hat{A}: E(\hat{A}) \subseteq E \to E$ este un operator liniar în spaţiul Hilbert E peste corpul complex $\mathbb{C}$, atunci numărul complex $\alpha \in \mathbb{C}$ se numeşte valoarea proprie a lui $\hat{A}$ dacă există cel puţin un vector $\psi \neq 0$ din $E(\hat{A})$, soluţie a ecuaţiei de vectori şi valori proprii

(4.24) $\hat{A}\psi = \alpha\psi$.

Fiecare din vectorii $\psi \in E(\hat{A})$ care sunt soluţii ale acestei ecuaţii se numeşte vector propriu al lui $\hat{A}$ asociat valorii proprii α şi mulţimea $E_\alpha(\hat{A})$ a tuturor vectorilor proprii ψ_α asociaţi aceleaşi valori proprii α, este un spaţiu liniar denumit subspaţiul caracteristic corespunzător valorii proprii α.

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

V.5. Operatori autoadjuncţi asociaţi mărimilor fizice fundamentale în Mecanica Cuantică. Proprietăţile acestora relative la ecuaţiile lor de vectori şi valori proprii

Din mulţimea $\Omega(E=\mathcal{L}^2(D\subseteq\mathbb{R}^3))$ a tuturor operatorilor liniari definiţi în (pe) spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$ cu valori în $\mathcal{L}^2(D)$, cele mai importante clase de operatori, utilizaţi în formalismul matematic al Mecanicii Cuantice, sunt reprezentate de clasa operatorilor unitari şi de cea a operatorilor autoadjuncţi. Justificarea acestei "alăturări" a gradelor de importanţă a celor două tipuri de operatori, cât şi rolul acestora în formalizarea Mecanicii Ondulatorii (şi într-un context mai general, a celei cuantice), vom încerca să le evidenţiem în cadrul paragrafului de faţă.

A. OPERATORI UNITARI

Definiţia 5.1. Un operator liniar $\hat{A}$, care transformă un spaţiu Hilbert E în el însuşi, se numeşte izometric, dacă invariază produsul scalar al oricăror două elemente din E, adică

(5.1) $(\hat{A}\psi,\hat{A}\varphi)=(\psi,\varphi)$, $(\forall)\ \psi,\varphi\in E$.

O verificare "imediată" a caracterului izometric al unui operator liniar $\hat{A}$ pe un spaţiu Hilbert E este posibilă aplicând

Teorema 5.1. Operatorul liniar $\hat{A}:E\to E$ este izometric dacă şi numai dacă

(5.2) $\|\hat{A}\psi\|=\|\psi\|$, pentru orice $\psi\in E$.

Demonstraţie. Dacă $\hat{A}$ este un operator izometric atunci relaţia (5.1), fiind valabilă oricare ar fi $\psi, \varphi \in E$, ea va rămâne valabilă şi în cazul $\varphi = \psi$ şi deci

$$(\hat{A}\psi, \hat{A}\psi) = \|\hat{A}\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \|\psi\|^2, \text{ adică } \|\hat{A}\psi\| = \|\psi\|, \ (\forall)\, \psi \in E.$$

Pentru a arăta că, dacă relaţia (5.2) are loc, oricare ar fi $\psi \in E$, atunci $\hat{A}$ este un operator izometric, adică verifică relaţia de definiţie (5.1), vom considera în E două elemente oarecare χ, σ şi vom exprima ψ sub forma

$$\psi = \chi + c\sigma,$$

oricare ar fi $c \in \mathbb{C}$. Inlocuind în relaţia (5.2), avem

$$\|\hat{A}\psi\|^2 = \left(\hat{A}(\chi + c\sigma), \hat{A}(\chi + c\sigma)\right) = \|\psi\|^2 = (\chi + c\sigma, \chi + c\sigma),$$

adică

$$\|\hat{A}\chi\|^2 + c(\hat{A}\chi, \hat{A}\sigma) + c^*(\hat{A}\sigma, \hat{A}\chi) + |c|^2 \|\hat{A}\sigma\|^2 =$$

(5.3)

$$= \|\chi\|^2 + c(\chi, \sigma) + c^*(\sigma, \chi) + |c|^2 \|\sigma\|^2 \ , \ (\forall)\ c \in \mathbb{C}\ ;\ \chi, \sigma \in E.$$

Cum (5.2) este satisfăcută pentru orice element din E, rezultă

$$\|\hat{A}\chi\| = \|\chi\| \ \text{şi} \ \|\hat{A}\sigma\| = \|\sigma\|,$$

astfel încât, relaţia (5.3) se scrie

$$[(\hat{A}\chi, \hat{A}\sigma) - (\chi, \sigma)]c + [(\hat{A}\chi, \hat{A}\sigma) - (\chi, \sigma)]^* c^* \equiv 0, \ (\forall) c \in \mathbb{C};\ \chi, \sigma \in E,$$

adică, în mod necesar

$$(\hat{A}\chi, \hat{A}\sigma) = (\chi, \sigma) \ , \ (\forall)\ \chi, \sigma \in E,$$

ceea ce înseamnă, în acord cu (5.1), că $\hat{A}$ este izometric.

(q.e.d.)

Definiţia 5.2. Un operator izometric $\hat{U}$, al cărui domeniu de valori $R(\hat{U})$ coincide cu întregul spaţiu Hilbert E, se numeşte operator

unitar.

Teorema 5.2. Orice operator izometric $\hat{U}$, care transformă un spaţiu Hilbert finit-dimensional E_n (cu $n = dim E_n < \infty$) în el însuşi, este unitar.

Demonstraţie. Fie $\underline{B}[E_n] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ o bază ortonormală în E_n şi $B'[E_n] = \{\hat{U}\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ "imaginea" ei sub acţiunea operatorului $\hat{U}$. Cum acesta este un operator izometric, rezultă că

$$(\hat{U}\chi_i, \hat{U}\chi_k) = (\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik} \quad , (\forall)\ i,k = \overline{1,n}$$

adică $B'[E_n]$ este un sistem n vectori ortonormali în E_n, ceea ce înseamnă că $\{\hat{U}\chi_i\}_{i=\overline{1,n}}$ este o bază ortonormală în E_n şi deci

$$span\{\hat{U}\chi_i\}_{i=\overline{1,n}} = E_n \text{ adică } R(\hat{U}) = \{\hat{U}\psi \mid (\forall)\psi \in E_n\} \equiv E_n.$$

(q.e.d.)

Dacă în spaţiile Hilbert finit-dimensionale, aşa cum rezultă din teorema 5.2, proprietăţile de izometrie şi unitaritate sunt complet echivalente, iar condiţia $R(\hat{U}) = E$ poate foarte uşor să treacă neobservată, în cazul spaţiilor Hilbert infinit-dimensionale ea devine esenţială în decelarea operatorilor unitari faţă de cei izometrici. In acest sens, este binecunoscut următorul exemplu de operator izometric pe spaţiul Hilbert infinit dimensional E, care nu este operator unitar pe E : fie $\underline{B}[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ o bază ortonormală în E şi $\hat{A}: E \to E$ un operator liniar definit prin

(5.4) $\hat{A}\chi_i = \chi_{i+m}$, cu m *fixat* ≥ 1.

Din (5.4) rezultă imediat că pentru orice

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \chi_i, \text{ cu } \{c_i\}_{i=\overline{1,\infty}} \in \mathbb{C},$$

avem

$$(\hat{A}\psi, \hat{A}\psi) = \sum_i \sum_k c_i^* c_k \left(\hat{A}\chi_i, \hat{A}\chi_k\right) =$$

$$= \sum_{i,k} c_i^* c_k \delta_{i+m,k+m} = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = (\psi, \psi),$$

adică $\|\hat{A}\psi\| = \|\psi\|$, $(\forall)\, \psi \in E$, deci în baza teoremei 5.1, $\hat{A}$ este un operator izometric. Dar, primii $\underline{m}$ vectori ai bazei $\underline{B}[E]$ nu aparţin domeniului de valori ale lui $\hat{A}$, deci $R(\hat{A}) \subset E$, adică operatorul izometric $\hat{A}$ nu este şi unitar pe E.

In vederea stabilirii unui criteriu eficient de verificare a unitarităţii unui operator liniar pe un spaţiu Hilbert, este utilă amintirea definiţiei inversului unui operator şi a proprietăţilor fundamentale ale sale.

Definiţia 5.3. Intr-un spaţiu Hilbert E, un operator liniar $\hat{A}$ se numeşte inversabil, dacă reprezintă o aplicaţie biunivocă de la $E(\hat{A})$ la $R(\hat{A})$. Operatorul $\hat{A}^{-1}: R(\hat{A}) \to E(\hat{A})$ se numeşte inversul operatorului $\hat{A}$, dacă pentru orice $\psi \in E(\hat{A})$ relaţia

$$\hat{A}\psi = \varphi \in R(\hat{A})$$

implică

$$\hat{A}^{-1}\varphi = \psi,$$

adică, în mod echivalent,

(5.5) $\hat{A}^{-1}\hat{A}\psi = \psi$, $(\forall)\, \psi \in E(\hat{A})$ sau $\hat{A}\hat{A}^{-1}\varphi = \varphi$, $(\forall)\, \varphi \in R(\hat{A})$.

BCU IASI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 5.3. Un operator liniar $\hat{A}:E(\hat{A})\to R(\hat{A})\subseteq E$ este inversabil dacă şi numai dacă $\hat{A}\psi=0$ implică $\psi=0$. In aceste condiţii, inversul său $\hat{A}^{-1}$ este de asemenea liniar, având domeniul de definiţie $E(\hat{A}^{-1})=R(\hat{A})$ şi domeniul de valori $R(\hat{A}^{-1})=E(\hat{A})$.

Demonstraţie. Dacă operatorul liniar $\hat{A}$ este inversabil, atunci, în baza definiţiei 5.3, el este injectiv, adică oricare ar fi elementele $\chi,\sigma\in E(\hat{A})$ avem

(5.6) $\hat{A}(\chi)=\hat{A}(\sigma)\Rightarrow\chi=\sigma$

şi, cum $\hat{A}$ este liniar, obţinem implicaţia

(5.7) $\hat{A}\chi-\hat{A}\sigma=\hat{A}(\chi-\sigma)=0\Rightarrow\chi-\sigma=0$,

adică, notând $\psi=\chi-\sigma$, rezultă că

(5.8) $\hat{A}\psi=0\Rightarrow\psi=0$.

Demonstraţia afirmaţiei reciproce, că (5.8) implică $\hat{A}$ inversabil, este evidentă, deoarece din (5.8), luând $\psi=\chi-\sigma$, rezultă (5.7) şi apoi (5.6), adică operatorul liniar $\hat{A}$ este injectiv, iar surjectivitatea decurge din însăşi definiţia domeniului său de valori, $R(\hat{A})=\hat{A}(E(\hat{A}))$. In aceeaşi manieră, din oricare din cele două relaţii (5.5) de la definiţia 5.3, rezultă că domeniul de definiţie al operatorului invers $\hat{A}^{-1}$ coincide cu domeniul de valori ale operatorului $\hat{A}$ şi că domeniul de valori ale lui $\hat{A}^{-1}$ coincide cu domeniul de definiţia a lui $\hat{A}$. Pentru a demonstra liniaritatea operatorului $\hat{A}^{-1}$ fie $\tilde{\psi},\tilde{\varphi}$ doi vectori arbitrari din $E(\hat{A}^{-1})=R(\hat{A})$ şi ψ,φ imaginile lor, din $R(\hat{A}^{-1})=E(\hat{A})$, prin $\hat{A}^{-1}$. Cum $\hat{A}$ este liniar, avem

(5.9) $\hat{A}(a\psi+b\varphi)=a\hat{A}\psi+b\hat{A}\varphi=a\tilde{\psi}+b\tilde{\varphi}$, $(\forall)a,b\in\mathbb{C}$.

Aplicând din stânga "peste ambii membri" ai relaţiei (5.9) operatorul invers $\hat{A}^{-1}$ obţinem, utilizând prima relaţie (5.5),

$$\hat{A}^{-1}\left(\hat{A}(a\psi+b\varphi)\right)=a\psi+b\varphi=\hat{A}^{-1}(a\tilde{\psi}+b\tilde{\varphi}),$$

adică

$$\hat{A}^{-1}(a\tilde{\psi}+b\tilde{\varphi})=a\hat{A}^{-1}\tilde{\psi}+b\hat{A}^{-1}\tilde{\varphi}\quad,\ (\forall)\ a,b\in\mathbb{C}\ ;\ \tilde{\psi},\tilde{\varphi}\in\left(\hat{A}^{-1}\right)=R(\hat{A}),$$

ceea ce înseamnă evident, în baza teoremei 4.5, că $\hat{A}^{-1}$ este un operator liniar.

Revenind la operatorii unitari, suntem în măsură să demonstrăm

Teorema 5.4. Un operator liniar $\hat{U}$ pe un spaţiu Hilbert E (deci $E(\hat{U})=E$) este unitar dacă şi numai dacă

(5.10) $\hat{U}^{+}\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^{+}=\hat{1}$,

adică, în mod echivalent,

(5.10') $\hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}$.

Demonstraţie. Dacă $\hat{U}$ este unitar atunci, din definiţia 5.2, teorema 5.1 şi definiţia 4.2, rezultă $\|\hat{U}\|=1$, deci $\hat{U}$ fiind mărginit pe E, adjunctul său $\hat{U}^{+}$ există şi are $E(\hat{U}^{+})=E$. Din $R(\hat{U})=E$ (definiţia 5.2) rezultă că în relaţia

$$(\hat{U}\psi,\varphi)=(\psi,\hat{U}^{+}\varphi)=(\hat{U}\psi,\hat{U}\hat{U}^{+}\varphi),$$

$\hat{U}\psi$ parcurge tot spaţiul Hilbert E atunci când ψ parcurge $E=E(\hat{U})$, ceea ce înseamnă că

$$\hat{U}\hat{U}^{+}\varphi=\varphi\quad,\ (\forall)\varphi\in E,$$

adică $\hat{U}\hat{U}^{+}=\hat{1}$. Conjugând hermitic ultima relaţie, utilizând proprietăţile (4.19.d) şi (4.19.a) de la teorema 4.17, rezultă imediat $\hat{U}^{+}\hat{U}=\hat{1}$.

Reciproca decurge imediat deoarece, dacă (5.10') este adevărată, atunci $R(\hat{U}) = E(\hat{U}^{-1}) = E(\hat{U}^{+}) = E$, iar din şirul de egalităţi

$$(\hat{U}\psi, \hat{U}\varphi) = (\hat{U}^{+}\hat{U}\psi, \varphi) = (\psi, \varphi)$$

rezultă că $\hat{U}: E \to E$ este şi izometric, deci este unitar pe E.

(q.e.d.)

In relaţie cu ei înşişi, importanţa operatorilor unitari în dezvoltarea formalismului matematic al mecanicii cuantice este evidenţiată de

Teorema 5.5. Orice schimbare de baze ortonormale $\underline{B}[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}} \leftrightarrow \underline{B}'[E] = \{\sigma_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ într-un spaţiu Hilbert E, se face prin intermediul unui operator unitar $\hat{U}: E \to E$.

Demonstraţie. Să arătăm mai întâi că, dacă $\underline{B}[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ este o bază ortonormală în E, iar $\hat{U}: E \to E$ este un operator unitar, atunci sistemul de vectori $\underline{B}'[E] = \{\sigma_i = \hat{U}\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ este de asemenea o bază ortonormală a lui E. Faptul că sistemul $\underline{B}'[E]$ este ortonormal, rezultă imediat din relaţiile:

$$(\sigma_i, \sigma_k) = (\hat{U}\chi_i, \hat{U}\chi_k) = (\chi_i, \hat{U}^{+}\hat{U}\chi_k) = (\chi_i, \chi_k) = \delta_{ik}, \quad (\forall) i,k \in \mathbb{N}^{*}.$$

De data aceasta, spaţiul Hilbert E considerat de noi fiind infinit dimensional, faptul că $\{\sigma_i = \hat{U}\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ reprezintă un sistem de vectori ortonormali nu este şi o garanţie că el formează o bază a lui E. In virtutea teoremei 2.29 (şi a definiţiei 2.29) trebuie să arătăm că $\underline{B}'[E]$ este total în E. In adevăr, să presupunem că există în E un vector ψ (care, pentru început, nu-i neapărat vectorul nul) astfel încât

$$\left(\psi, \hat{U}\chi_i\right) = 0 \quad , (\forall) i \in \mathbb{N}^* .$$

Dat fiind că operatorul $\hat{U}^+$ există, avem

$$\left(\hat{U}^+\psi, \chi_i\right) = 0 \quad , (\forall) i \in \mathbb{N}^*$$

şi cum $\underline{B}[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ formează o bază ortonormală a lui E, iar $\hat{U}$ este unitar, rezultă

$$\hat{U}^+\psi = 0 \Rightarrow \hat{U}\hat{U}^+\psi = \hat{U}(0) \Rightarrow \psi = 0,$$

adică, din teorema 2.29, sistemul ortonormal $\underline{B}'[E] = \left\{\sigma_i = \hat{U}\chi_i\right\}_{i=\overline{1,\infty}}$ fiind total în E formează o bază ortonormală a lui E. Să trecem acum la demonstrarea teoremei propriu zise, adică să arătăm că trecerea de la baza ortonormală $\underline{B}[E] = \{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ la $\underline{B}'[E] = \{\sigma_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ se face prin intermediul acţiunii unui operator liniar $\hat{U}$ care este cu necesitate unic (în raport cu cele două baze $\underline{B}[E]$ şi $\underline{B}'[E]$) şi unitar. Dat fiind că E este un spaţiu Hilbert, putem exprima orice vector al său ψ sub forma

$$(5.11) \quad \psi = \sum_{i=1}^{\infty} (\chi_i, \psi)\chi_i$$

şi putem defini un operator liniar $\hat{U}: E \to E$ prin relaţia

$$(5.12) \quad \hat{U}\psi = \sum_{i=1}^{\infty} (\chi_i, \psi)\hat{U}\chi_i = \sum_{i=1}^{\infty} (\chi_i, \psi)\sigma_i ,$$

unde vectorii $\{\sigma_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ sunt elementele bazei ortonormale $\underline{B}'[E]$ a lui E. Din însăşi definiţia acţiunii operatorului $\hat{U}$ asupra oricărui $\psi \in E$ rezultă că $R(\hat{U}) = E$ şi de asemenea este unic. Pentru a demonstra unitaritatea operatorului liniar $\hat{U}$ trebuie să mai arătăm că el este izometric. In

BCU ACENTRALA UNIVERSITARA LIBRARY

adevăr, aplicând teorema 5.1 şi luând în considerare caracterul hilbertian al spaţiului E şi faptul că $\underline{B}[E]=\{\chi_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ şi $\underline{B}'[E]=\{\sigma_i\}_{i=\overline{1,\infty}}$ sunt două baze ortonormale, rezultă

$$\|\hat{U}\psi\|^2=(\hat{U}\psi,\hat{U}\psi)=\sum_{i,k=1}^{\infty}(\chi_i,\psi)^*(\chi_k,\psi)\delta_{ik}=$$

$$=\sum_{i=1}^{\infty}|(\chi_i,\psi)|^2=(\psi,\psi)=\|\psi\|^2\ ,\ \forall\psi\in E,$$

şi deci

(5.13) $\|\hat{U}\psi\|=\|\psi\|\ ,\ (\forall)\psi\in E$ (q.e.d.).

B. OPERATORI AUTOADJUNCTI. PROPRIETATILE DE HERMITICITATE SI AUTOADJUNCTIVITATE ALE OPERATORILOR COORDONATA, IMPULS SI HAMILTONIAN

Dacă puţin mai înainte vorbeam despre importanţa operatorilor unitari "în relaţie cu ei înşişi", în prima parte a acestui subparagraf vom justifica importanţa acestora în relaţie cu cea de a doua clasă remarcabilă de operatori utilizaţi în Mecanica Cuantică şi anume, operatorii autoadjuncţi. Mai precis, vom demonstra un rezultat deosebit de puternic şi cu largă aplicabilitate în teoria operatorilor autoadjuncţi, cunoscut sub numele de "criteriul Cayley de autoadjunctivitate a operatorilor simetrici":

Un operator simetric este autoadjunct dacă şi numai dacă operatorul Cayley asociat este unitar.

In a doua parte a subparagrafului, vom întrerupe într-o oarecare măsură incursiunea în zonele tot mai abstracte ale teoriei operatorilor

liniari în spaţii Hilbert şi, revenind la operatorii coordonată, impuls şi hamiltonian introduşi în capitolul IV, cu ocazia justificării Ecuaţiei de Evoluţie ca ecuaţie fundamentală a Mecanicii Cuantice, vom aplica rezultatele acumulate până acum, efectuând o analiză destul de detaliată a domeniilor de definiţie şi a proprietăţilor de hermiticitate şi autoadjunctivitate ale acestor operatori.

Definiţia 5.4. Un operator $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E definit pe $E(\hat{A})\subset E$ cu valori în E se numeşte hermitic dacă

(5.14) $(\hat{A}\psi,\varphi)=(\psi,\hat{A}\varphi)$

oricare ar fi vectorii $\psi,\varphi\in E(\hat{A})$.

Definiţia 5.5. Un operator liniar $\hat{A}:E(\hat{A})\subset E\to R(\hat{A})\subset E$ se numeşte simetric, dacă $E(\hat{A})$ este dens în E, deci $\overline{E(\hat{A})}=E$, iar operatorul adjunct $\hat{A}^+$ este o extensie a lui $\hat{A}$, adică $\hat{A}^+\supset\hat{A}$ (sau echivalent $\hat{A}^+=\hat{A}$ pe $E(\hat{A})$ şi $E(\hat{A}^+)\supset E(\hat{A})$).

Din definiţiile 5.4 şi 5.5 este practic evident următorul criteriu de stabilire a simetriei operatorilor liniari hermitici.

Teorema 5.6. Un operator liniar hermitic în spaţiul Hilbert E este simetric dacă $\overline{E(\hat{A})}=E$.

Definiţia 5.6. Un operator simetric $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E se numeşte autoadjunct, dacă el reprezintă o extensie a adjunctului său $\hat{A}^+$ adică, ($\hat{A}$ fiind simetric)

(5.15) $\hat{A}^+\equiv\hat{A}$, $E(\hat{A}^+)=E(\hat{A})$.

Referitor la operatorii simetrici definiţi pe un spaţiu Hilbert E, există următorul rezultat important.

Teorema 5.7 (*Herlinger-Toeplitz*). Orice operator simetric $\hat{A}$, având ca domeniu de definiţie $E(\hat{A})$ întregul spaţiu Hilbert E, este autoadjunct şi mărginit.

Demonstraţie. Din faptul că $\hat{A}$ este simetric rezultă $\hat{A}^{+}=\hat{A}$ pe $E(\hat{A})$ şi $E\supset E(\hat{A}^{+})\supset E(\hat{A})$, iar din $E(\hat{A})=E$ rezultă imediat că $\hat{A}^{+}\equiv\hat{A}$, adică $\hat{A}$ este operator autoadjunct pe spaţiul Hilbert E. In plus, din teorema 4.21 deducem că $\hat{A}^{+}$ este mărginit şi deci operatorul simetric $\hat{A}:E\to E$ este de asemenea mărginit. (q.e.d.)

O proprietate invariantă a tuturor operatorilor autoadjuncţi este dată de

Teorema 5.8. Orice operator autoadjunct este "totdeauna" un operator închis.

Demonstraţia rezultă imediat din faptul că $\hat{A}\equiv\hat{A}^{+}$, iar $\hat{A}^{+}$ este un operator închis, după cum am demonstrat în teorema 4.20. (q.e.d.)

In următoarele câteva teoreme referitoare la operaţii algebrice cu operatori autoadjuncţi ne vom referi la aceştia, deoarece orice operator autoadjunct este simetric şi orice operator simetric este liniar hermitic.

Teorema 5.9. Dacă $\hat{A}:E(\hat{A})\to E$ şi $\hat{B}:E(\hat{B})\to E$ sunt doi operatori autoadjuncţi şi $E(\hat{A})\cap E(\hat{B})\neq\varnothing$ atunci suma lor $(\hat{A}+\hat{B}):E(\hat{A})\cap E(\hat{B})\to E$ este de asemenea un operator autoadjunct.

Demonstraţie. Pentru oricare două elemente $\psi,\varphi\in E(\hat{A})\cap E(\hat{B})$ avem

$$\left(\psi,(\hat{A}+\hat{B})\varphi\right)=(\psi,\hat{A}\varphi+\hat{B}\varphi)=(\psi,\hat{A}\varphi)+(\psi,\hat{B}\varphi)=$$

$$=(\hat{A}^{+}\psi,\varphi)+(\hat{B}^{+}\psi,\varphi)=(\hat{A}^{+}\psi+\hat{B}^{+}\psi,\varphi)=\left((\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+})\psi,\varphi\right)=\left((\hat{A}+\hat{B})\psi,\varphi\right),$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică,

$$(\hat{A}+\hat{B})=\hat{A}^{+}+\hat{B}^{+}=(\hat{A}+\hat{B})^{+}$$

(5.16)

$$E(\hat{A}+\hat{B})=E(\hat{A})\cap E(\hat{B})=E(\hat{A}^{+})\cap E(\hat{B}^{+})=E((\hat{A}+\hat{B})^{+}).$$

Observaţie. Când nu se pun probleme legate de domeniile de definiţie ale celor doi operatori $\hat{A},\hat{B}$, teorema 5.9 se enunţă simplu, sub forma

Suma a doi operatori autoadjuncţi este întotdeauna un operator autoadjunct.

Teorema 5.10. Dacă $\hat{A},\hat{B}$ sunt doi operatori autoadjuncţi într-un spaţiu Hilbert E, astfel încât $R(\hat{A})\subset E(\hat{B})\subset E(\hat{A})$ şi $R(\hat{B})\subset E(\hat{A})$, atunci

(5.17) $(\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}\hat{A}$.

Demonstraţie. Deoarece $R(\hat{B})\subset E(\hat{A})$ şi $\hat{B}$ este autoadjunct, rezultă că operatorul $\hat{A}\hat{B}$ există şi domeniul său de definiţie $E(\hat{B})$ este dens în E, adică există şi adjunctul $(\hat{A}\hat{B})^{+}$ cu $E((\hat{A}\hat{B})^{+})\supset E(\hat{B})$. Incluziunea $R(\hat{A})\subset E(\hat{B})$ provine din necesitatea existenţei operatorului produs $\hat{B}\hat{A}$. In continuare, avem

$$(\psi,\hat{A}\hat{B}\varphi)=(\hat{A}^{+}\psi,\hat{B}\varphi)=(\hat{A}\psi,\hat{B}\varphi)=$$

$$=(\hat{B}^{+}\hat{A}\psi,\varphi)=(\hat{B}\hat{A}\psi,\varphi)=\left((\hat{A}\hat{B})^{+}\psi,\varphi\right),$$

oricare ar fi $\psi\in E(\hat{A})$ şi $\varphi\in E(\hat{B})$, adică $(\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}\hat{A}$ pe $E(\hat{A})$.

(q.e.d.)

Intervertind operatorii $\hat{A},\hat{B}$ peste tot în conţinutul şi demonstraţia teoremei 5.10, rezultă imediat

Teorema 5.11. Dacă $\hat{A},\hat{B}$ sunt doi operatori autoadjuncţi într-un spaţiu Hilbert E astfel încât $R(\hat{B})\subset E(\hat{A})\subset E(\hat{B})$ şi $R(\hat{A})\subset E(\hat{B})$ atunci

(5.17') $(\hat{B}\hat{A})^+ = \hat{A}\hat{B}$.

Observaţie. Dacă suntem din nou într-o situaţie în care nu apar probleme legate de domeniile de definiţie şi de valori ale operatorilor autoadjuncţi $\hat{A},\hat{B}$, atunci teoremele 5.10 şi 5.11 se demonstrează foarte simplu, apelând la relaţia (4.19.d) din teorema 4.17 şi la definiţia 5.6, adică

$$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A} \text{ şi } (\hat{B}\hat{A})^+ = \hat{A}^+\hat{B}^+ = \hat{A}\hat{B}.$$

Din oricare din teoremele 5.10 şi 5.11, dacă $E(\hat{A})=E(\hat{B})$ şi domeniile de valori sunt astfel încât operatorii $\hat{A}\hat{B}$ şi $\hat{B}\hat{A}$ există, rezultă următoarea proprietate importantă, pe care mai ales "începătorii" este bine să o reţină:

Teorema 5.12. Produsul operatorilor autoadjuncţi $\hat{A},\hat{B}$ este un operator autoadjunct dacă şi numai dacă cei doi operatori comută, adică

(5.18) $$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A} \leftrightarrow [\hat{A},\hat{B}]\equiv \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0.$$

Demonstraţia este deosebit de simplă deoarece, dacă $\hat{A}\hat{B}$ este autoadjunct, atunci trebuie să avem $(\hat{A}\hat{B})^+=\hat{A}\hat{B}$ iar, din teorema 5.10, ştim că $(\hat{A}\hat{B})^+=\hat{B}\hat{A}$. Rezultă astfel că $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$ ceea ce înseamnă, introducând notaţia $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ consacrată în Mecanica Cuantică comutatorului a doi operatori, că $[\hat{A},\hat{B}]=0$. Reciproc, dacă cei doi operatori autoadjuncţi comută, deci $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$, atunci tot din relaţia teoremei 5.10 avem $(\hat{A}\hat{B})^+=\hat{B}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}$ şi deci $\hat{A}\hat{B}$ este autoadjunct. (q.e.d.)

Nu vom insista mai mult, în cadrul acestui (sub)paragraf, asupra comutatorilor şi proprietăţilor lor deoarece, într-un context destul de general, bazat pe teoria grupurilor continue şi a algebrelor Lie asociate, aceştia vor fi introduşi şi studiaţi în paragraful următor.

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru a încheia prima parte a subparagrafului de faţă, să definim operatorul Cayley asociat unui operator liniar $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E, şi să menţionăm două teoreme, cu ajutorul cărora vom demonstra, urmându-l pe E. Prugovički în lucrarea [49], teorema 5.15, care stabileşte criteriul Cayley de autoadjunctivitate a unui operator simetric.

Definiţia 5.7. Operatorul liniar

(5.19) $K=(\hat{A}-i)(\hat{A}+i)^{-1}$

se numeşte operatorul Cayley asociat operatorului liniar $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E, şi, dacă $(\hat{A}+i)^{-1}$ există, atunci $E(\hat{K})= R(\hat{A}+i)$ şi $R(\hat{K})= R(\hat{A}-i)$.

Teorema 5.13. Un operator liniar $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E, pentru care operatorul Cayley asociat există, se poate exprima în raport cu acesta prin relaţia

(5.20) $\hat{A} = i(1+\hat{K})(1-\hat{K})^{-1}$,

iar domeniul său de definiţie $E(\hat{A})$ coincide cu domeniul $R(1-\hat{K})$.

Demonstraţie. Din definiţia 5.7 rezultă că domeniul de valori ale lui $\hat{K}$ este reprezentat de vectorii φ din $R(\hat{A}+i)$ pentru care există în $E(\hat{A})$ vectorii ψ astfel încât

(5.21) $\varphi = (\hat{A}+i)\psi$.

Prin aplicarea operatorului Cayley, obţinem relaţia

$$\hat{K}\varphi = (\hat{A}-i)(\hat{A}+i)^{-1}(\hat{A}+i)\psi,$$

adică avem

(5.22) $\hat{K}\varphi = (\hat{A}-i)\psi$.

Din (5.21) şi (5.22) rezultă:

(5.23) a) $(1+\hat{K})\varphi = 2\hat{A}\psi$

b) $(1-\hat{K})\varphi = 2i\psi$.

Pentru ca $(1-\hat{K})$ să fie inversabil trebuie ca, în baza teoremei 5.3,

(5.24) $(1-\hat{K})\varphi = 0 \Rightarrow \varphi = 0$.

Ori, observăm că $(1-\hat{K})\varphi = 0$ implică, prin (5.23.b), $\psi = 0$, ceea ce conduce, prin relaţia (5.21), la $\varphi = 0$ şi astfel, implicaţia (5.24) <u>există</u>, adică operatorul $1-\hat{K}$ este <u>inversabil</u>, având, după cum reiese din (5.23.b), domeniul de valori $R((1-\hat{K})) = E(\hat{A})$. Prin urmare, inversul său, $(1-\hat{K})^{-1}$, va avea domeniul de definiţie $E((1-\hat{K})^{-1}) \equiv E(\hat{A})$, iar, prin aplicarea lui "din stânga" relaţiei (5.23.b) şi înlocuire apoi în (5.23.a), rezultă

$$\hat{A} = i(1+\hat{K})(1-\hat{K})^{-1}.$$

Teorema 5.14. Operatorul Cayley asociat unui operator <u>închis</u> şi <u>simetric</u> $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E este un operator <u>izometric</u> pe subspaţiul liniar închis $R(\hat{A}+i) \subset E$, cu valori pe subspaţiul liniar închis $R(\hat{A}-i) \subset E$.

Demonstraţie. Să arătăm mai întâi că operatorul Cayley asociat lui $\hat{A}$ există. Deoarece $E(\hat{A}\pm i) = E(\hat{A})$, avem

(5.25) $\|(\hat{A}\pm i)\psi\|^2 = \|\hat{A}\psi\|^2 \mp i(\psi, \hat{A}\psi) \pm i(\hat{A}\psi, \psi) + \|\psi\|^2$, $(\forall)\psi \in E(\hat{A})$

şi cum $\hat{A}$ este simetric, deci $\hat{A}^+ = \hat{A}$ pe $E(\hat{A})$, rezultă

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^+\psi, \psi) = (\hat{A}\psi, \psi),$$

adică, înlocuind în (5.25), obţinem

(5.26) $\|(\hat{A}\pm i)\psi\|^2 = \|\hat{A}\psi\|^2 + \|\psi\|^2$.

BOOKS CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

De aici rezultă că pentru

$$\|(\hat{A}\pm i)\psi\| = 0$$

avem

$$\|\hat{A}\psi\|^2 + \|\psi\|^2 = 2\|\psi\|^2 = 0,$$

adică $\psi = 0$ şi deci operatorii $(\hat{A}\pm i)$ sunt inversabili. Cum

$$\hat{K} = (\hat{A}-i)(\hat{A}+i)^{-1}$$

şi $(\hat{A}+i)^{-1}$ există, rezultă că operatorul Cayley asociat lui $\hat{A}$ există, având $E(\hat{K}) = R(\hat{A}+i)$ şi $R(\hat{K}) = R(\hat{A}-i)$. De asemenea, este clar că operatorul Cayley este liniar, fiind produsul a doi operatori liniari, iar $E(\hat{K})$ şi $R(\hat{K})$ sunt subspaţii liniare ale lui E, deoarece ele reprezintă domeniile de valori ale operatorilor liniari $\hat{A}+i$ şi $\hat{A}-i$. Faptul că subspaţiile liniare $R(\hat{A}+i)$ şi $R(\hat{A}-i)$ sunt închise rezultă imediat utilizând inegalitatea

$$\|\psi\| \le \|(\hat{A}\pm i)\psi\| \ , \ (\forall)\,\psi \in E(\hat{A}),$$

obţinută din (5.26), şi proprietatea operatorului $\hat{A}$ de a fi închis. Pentru a arăta că operatorul Cayley $\hat{K}$ asociat operatorului simetric $\hat{A}$ este un operator izometric, observăm din relaţia (5.26) că

(5.27) $\|(\hat{A}-i)\varphi\| = \|(\hat{A}+i)\varphi\|$, $(\forall)\,\varphi \in E(\hat{A})$,

şi deci, înlocuind

$$\varphi = (\hat{A}+i)^{-1}\psi \ , \ \psi \in R(\hat{A}+i),$$

obţinem

(5.28) $\|(\hat{A}-i)(\hat{A}+i)^{-1}\psi\| = \|\hat{K}\psi\| = \|(\hat{A}+i)(\hat{A}+i)^{-1}\psi\| = \|\psi\|$, $(\forall)\,\psi \in R(\hat{A}+i)$,

adică $\|\hat{K}\psi\| = \|\psi\|$, ceea ce demonstrează, în baza teoremei 5.1, că operatorul Cayley $\hat{K}$ pentru $\hat{A}$ simetric, este izometric. (q.e.d.)

In fine, după toate aceste pregătiri, am ajuns la

Teorema 5.15. Un operator simetric $\hat{A}$, în spaţiul Hilbert E, este autoadjunct dacă şi numai dacă operatorul Cayley asociat $\hat{K}=(\hat{A}-i)(\hat{A}+i)^{-1}$ este unitar.

Demonstraţie. Fie $\hat{K}$ unitar şi să arătăm că $\hat{A}$ este autoadjunct. Cum $\hat{A}$ este simetric, adjunctul său există şi avem pentru $\varphi \in E(\hat{A}^+)$

(5.29) $(\hat{A}^+\varphi,\psi)=(\varphi,\hat{A}\psi)$

oricare at fi $\psi \in E(\hat{A})$. Deoarece, în baza teoremei 5.13, $E((1-\hat{K})^{-1})=R(1-\hat{K})=E(\hat{A})$, rezultă că pentru fiecare $\psi \in E(\hat{A})$ există un vector χ în $E(\hat{K})=E$ astfel încât

(5.30) $\psi=(1-\hat{K})\chi$

şi deci, utilizând expresia (5.20),

(5.31) $\hat{A}\psi=i(1+\hat{K})\chi$.

Inlocuind (5.30) şi (5.31) în relaţia (5.29), aceasta devine

$$(\hat{A}^+\varphi,(1-\hat{K})\chi)=i(\varphi,(1+\hat{K})\chi),$$

adică

(5.32) $(\hat{A}^+\varphi,\chi)-(\hat{A}^+\varphi,\hat{K}\chi)=i(\varphi,\chi)+i(\varphi,\hat{K}\chi)$, $(\forall)\chi \in E$.

Cum $\hat{K}$ este unitar, avem

$$(\hat{A}^+\varphi,\hat{K}^+\hat{K}\chi)=(\hat{K}\hat{A}^+\varphi,\hat{K}\chi)$$

$$(\varphi,\hat{K}^+\hat{K}\chi)=(\hat{K}\varphi,\hat{K}\chi),$$

astfel încât (5.32) se poate scrie sub forma

$$(i(1+\hat{K})\varphi-(1-\hat{K})\hat{A}^+\varphi,\hat{K}\chi)=0,$$

oricare ar fi $(\hat{K}\chi)\in E$, ceea ce conduce la relaţia

(5.33) $(1-\hat{K})\hat{A}^+\varphi=i(1+\hat{K})\varphi$.

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

De aici deducem că

$$\varphi = -\hat{K}\varphi - i(1-\hat{K})\hat{A}^+\varphi$$

şi adunând câte un φ în ambii membri, obţinem

(5.34) $$\varphi = \frac{1}{2}(1-\hat{K})[\varphi - i\hat{A}^+\varphi].$$

Astfel, relaţia (5.34) arată că ori de câte ori $\varphi \in E(A^+)$, el aparţine şi lui $R(1-\hat{K})=E(\hat{A})$ (vezi teorema 5.13) adică, $E(\hat{A}^+)\subseteq E(\hat{A})$. Cum $\varphi \in E(\hat{A})$, putem aplica "din stânga" relaţiei (5.34) operatorul $\hat{A}$ dat de (5.20) şi obţinem

(5.35) $$\hat{A}\varphi = \frac{i}{2}(1+\hat{K})[\varphi - i\hat{A}^+\varphi].$$

In acelaşi timp, din (5.33) putem "explicita" $\hat{A}^+\varphi$, în mod cu totul asemănător "explicitării" anterioare a lui φ. Avem

$$\hat{A}^+\varphi = i(1+\hat{K})\varphi + \hat{K}\hat{A}^+\varphi,$$

de unde deducem, adunând câte un $\hat{A}^+\varphi$ în ambii membri şi dând apoi factor pe $i(1+\hat{K})$

(5.36) $$\hat{A}^+\varphi = \frac{i}{2}(1+\hat{K})[\varphi - i\hat{A}^+\varphi],$$

ceea ce arată, prin comparare cu (5.35), că

$$\hat{A}^+\varphi = \hat{A}\varphi,$$

adică $\hat{A}$ este o extensie a lui $\hat{A}^+$. Dat fiind că $\hat{A}$ este simetric, deci prin ipoteză $\hat{A}^+\supseteq\hat{A}$, iar relaţiile (5.33), (5.34), (5.35) şi (5.36) ne-au condus la concluzia $\hat{A}\supseteq\hat{A}^+$, rezultă, din chiar condiţiile definiţiei (5.6), că operatorul simetric $\hat{A}$ este autoadjunct (când $\hat{K}^{-1}=\hat{K}^+$). Demonstraţia

afirmaţiei reciproce, că $\hat{A}$=*autoadjunct* $\rightarrow$ $\hat{K}$=*unitar* este cu mult mai simplu, deoarece $\hat{A}$, fiind autoadjunct, este "automat" închis şi simetric (teorema 5.8 şi definiţia 5.6) şi, aplicând teorema 5.14, ştim că operatorul Cayley asociat lui există, este izometric şi are domeniile de definiţie şi de valori închise. In baza definiţiei 5.2, pentru a arăta că operatorul Cayley, dat de (5.19), este unitar, va fi suficient să demonstrăm că $R(\hat{K}) = R(\hat{A}-i) = \overline{R(\hat{A}-i)}$ este întregul spaţiu E, deci că $R(\hat{A}-i)$ este dens în E. Fie pentru aceasta, un vector $\varphi \in E$ pe care îl presupunem ortogonal pe $R(\hat{A}-i)$, adică

$$(\varphi,(\hat{A}-i)\psi)=0\ ,\ (\forall)\,\psi\in E(\hat{A})\,.$$

Cum $\hat{A}$ este autoadjunct, $(\hat{A}-i)^+ = \hat{A}+i$ şi deci

$$0=(\varphi,(\hat{A}-i)\psi)=((\hat{A}-i)^+\varphi,\psi)=((\hat{A}+i)\varphi,\psi)\ ,\ (\forall)\ \psi\in E(\hat{A})\,,$$

de unde rezultă ecuaţia

$$(\hat{A}+i)\varphi = 0\,,$$

care ne conduce, având în vedere relaţia (5.26) de la teorema 5.14, la implicaţia

$$(\hat{A}+i)\varphi=0 \rightarrow \varphi=0\,,$$

ceea ce demonstrează că $R(\hat{A}-i)$ este dens în E şi deci $R(\hat{K})=H$(q.e.d.)

Să trecem acum la partea a doua a prezentului subparagraf şi să ne amintim că în paragraful IV.6 am introdus, în decursul justificării Ecuaţiei de Evoluţie (IV.6.18), operatorii coordonată $\hat{x}^a$ prin relaţia (IV.6.20.a), impuls $\hat{p}_a$ prin (IV.6.14.a), Hamilton $\hat{H}$ (IV.6.16) şi Hamilton-Schrödinger $\hat{H}_s$ (IV.6.36). Tot cu acea ocazie am dat o formulare, să spunem acceptabilă, Principiului de Corespondenţă care stabilea, ca o parte esenţială a conţinutului ei, că în Mecanica Cuantică,

oricărei observabile (clasice) $A(\vec{x},\vec{p},t)$ i se asociază, în reprezentarea de configuraţie $\left\{\vec{x}=\vec{x},\vec{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla,t\right\}$, un operator liniar $\hat{A}(\vec{x},\vec{p},t)$, care, spuneam noi atunci, trebuie să fie hermitic, în sensul relaţiei (IV.6.21). Evident, la "acea vreme", orice discuţie referitoare la domeniile de definiţie şi de valori ale operatorului liniar hermitic $\hat{A}$, care să elucideze posibilul caracter simetric, sau autoadjunct, al acestuia, ar fi fost cu totul prematură. De aceea, ne propunem să facem acum acest lucru, adică să analizăm condiţiile referitoare la domeniile de definiţie, din spaţiul Hilbert $E=\mathcal{L}^2(D\subseteq\mathbb{R}^f)$, a operatorilor coordonată, impuls, Hamilton-Schrödinger şi Hamilton, astfel încât aceştia să fie hermitici, iar apoi, să aplicăm rezultatul teoremei 5.15 pentru a stabili autoadjunctivitatea lor.

Deoarece, în demersul pe care îl vom efectua, vom întâlni o clasă specială (şi foarte importantă) de spaţii de funcţii, ca subspaţii ale lui $\mathcal{L}^2(D)$, anume spaţiile Sobolev $\mathcal{L}^2_k(D)$ şi spaţiile Sobolev "restricţionate" ${}_o\mathcal{L}^2_k(D)$, prezentăm foarte pe scurt noţiunile strict necesare referitoare la acestea şi menţionăm, fără demonstraţie, vestita teoremă a lui Sobolev [33], [59], [60] de apartenenţă la spaţiul ${}_o\mathcal{L}^2_1(D)$ a oricărei funcţii din $\mathcal{L}^2_1(D)$ care se anulează pe frontiera ∂D a lui $D\subseteq\mathbb{R}^f$.

Notând cu $C^\infty_b(D)$ mulţimea funcţiilor (complexe de variabile reale) definite pe D, indefinit derivabile şi cu suport compact inclus în D, şi cu

$$(5.37)\quad D^\alpha\psi=\frac{\partial^{|\alpha|}\psi}{\partial(x^1)^{\alpha_1}...\partial(x^f)^{\alpha_f}},\ \mathbb{N}\ni|\alpha|=\alpha_1+..+\alpha_f,\ f=dim D,$$

derivata mixtă de ordin α în raport cu un sistem de coordonate locale $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ pe D, se poate formula

Definiţia 5.8. O funcţie $\psi \in \mathcal{L}^2(D)$ spunem că admite derivată generalizată de ordinul α, dacă există $\varphi \in \mathcal{L}^2(D)$ astfel încât

$$(5.38)\quad \int_D \psi D^\alpha u\, d^f x = (-1)^{|\alpha|} \int_D \varphi u\, d^f x\ ,\ (\forall)\ u \in C_b^\infty(D).$$

Funcţia φ se numeşte derivată generalizată de ordin α a funcţiei ψ şi se notează de asemenea cu $D^\alpha \psi$.

Referitor la legătura ce poate exista între derivatele parţiale (obişnuite) ale unei funcţii şi derivatele generalizate corespunzătoare, ale funcţiei respective, este cunoscută

Propoziţia 5.1. Dacă pentru o funcţie dată, derivatele parţiale de ordinul α există, atunci acestea sunt egale cu derivatele generalizate de acelaşi ordin α. Afirmaţia reciprocă nu este în general adevărată.

Definiţia 5.9. Se numeşte spaţiu Sobolev $\mathcal{L}_k^2(D)$ submulţimea spaţiului $\mathcal{L}^2(D)$ formată din toate funcţiile ψ pentru care toate derivatele generalizate $\{D^\alpha \psi\}_{0 \le |\alpha| \le k}$ (până la ordinul k inclusiv) există şi sunt pătratic integrabile (în sens Lebesgue) pe $D \subset \mathbb{R}^f$. Putem deci scrie

$$(5.39)\quad \mathcal{L}_k^2(D) = \{\psi \in \mathcal{L}^2(D) \mid \ni D^\alpha \psi \in \mathcal{L}^2(D),\ (\forall)\, |\alpha| \le k\}.$$

Pe spaţiul Sobolev $\mathcal{L}_k^2(D)$ produsul scalar al oricăror două elemente ale sale este definit prin relaţia

$$(5.40)\quad (\psi, \varphi)_k = \int_D \sum_{|\alpha| \le k} D^\alpha \psi^* \cdot D^\alpha \varphi\, d^f x = \sum_{|\alpha| \le k} (D^\alpha \psi, D^\alpha \varphi).$$

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 5.16. In raport cu produsul scalar $(\cdot,\cdot)_k$ şi cu norma $\|*\|_k = \sqrt{|(*,*)_k|}$ indusă de acesta, spaţiul $\mathfrak{L}^2_k(D)$ este hilbertian.

Demonstraţia este prezentată pe larg în [33].

Definiţia 5.10. Se numeşte spaţiu Sobolev restricţionat ${}_o\mathfrak{L}^2_k(D)$ închiderea mulţimii $C^\infty_b(D)$ în norma $\|\cdot\|_k$ definită pe spaţiul Sobolev $\mathfrak{L}^2_k(D)$.

In aplicaţii, după cum vom vedea în continuare (şi dat fiind că marea majoritate a ecuaţiilor "înlâlnite în Fizică" sunt ecuaţii diferenţiale liniare cu derivate parţiale de ordinul I şi II), spaţiul Sobolev $\mathfrak{L}^2_2(D)$ şi spaţiul Sobolev restricţionat ${}_o\mathfrak{L}^2_1(D)$ beneficiază de o poziţie evident privilegiată.

Astfel, în cazul spaţiului ${}_o\mathfrak{L}^2_1(D)$ se pot demonstra, [44] şi [59], [60] următoarele rezultate deosebit de importante.

Teorema 5.17. Pe ${}_o\mathfrak{L}^2_1(D)$ aplicaţia

$$(5.41)\qquad {}_o\|\psi\|_1 = \left[\sum_{i=1}^{f}\int_D \left|\frac{\partial\psi}{\partial x^i}\right|^2 d^f x\right]^{1/2}, \quad (\forall)\,\psi \in {}_o\mathfrak{L}^2_1(D),$$

este o normă echivalentă (normei $\|\cdot\|_1$ de pe $\mathfrak{L}^2_1(D)$) fiind indusă de produsul scalar

$$(5.42)\qquad {}_o(\psi,\varphi)_1 = \sum_{i=1}^{f}\int_D \frac{\partial\psi^*}{\partial x^i}\frac{\partial\varphi}{\partial x^i}d^f x = \sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x^i},\frac{\partial\varphi}{\partial x^i}\right)$$

BCU IAŞI / CENTRUL UNIVERSITAR

Teorema 5.18. Spaţiul Sobolev restricţionat ${}_{\circ}\mathfrak{L}_k^2(D)$ înzestrat cu produsul scalar $(\cdot,\cdot)_k$ şi norma indusă $\|\cdot\|_k$ este hilbertian.

Corolar 5.1 (al teoremelor 5.17, 5.16). Spaţiul ${}_{\circ}\mathfrak{L}_1^2(D)$ înzestrat cu produsul scalar ${}_{\circ}(\cdot,\cdot)_1$ şi norma indusă ${}_{\circ}\|\cdot\|_1$ este hilbertian.

Teorema 5.19. Orice mulţime mărginită din ${}_{\circ}\mathfrak{L}_1^2(D)$ (sau $\mathfrak{L}_1^2(D)$) este compactă în $\mathfrak{L}^2(D)$.

Teorema 5.20. (*Sobolev*) Un element ψ din spaţiul Sobolev $\mathfrak{L}_1^2(D)$ aparţine spaţiului Sobolev restricţionat ${}_{\circ}\mathfrak{L}_1^2(D)$ dacă şi numai dacă verifică pe frontiera lui D condiţia $\psi|_{\partial D}=0$.

Referitor la această teoremă, aşa cum se arată şi în lucrările [48] şi [33], au fost demonstrate într-un context mai general [38], [42] următoarele două teoreme.

Teorema 5.21. Aproape în orice punct $x_0\in\partial D$ fiecare element ψ din $\mathfrak{L}_1^2(D)$ satisface condiţia

(5.43) $\lim\limits_{\varepsilon\to 0_+}\psi\left(\vec{x}_0-\varepsilon\,\vec{n}(x_0)\right)=0$,

unde $\vec{n}(x_0)$ este normala exterioară la ∂D faţă de D în punctul x_0.

Teorema 5.22. Spaţiul Sobolev restricţionat ${}_{\circ}\mathfrak{L}_k^2(D)$ coincide cu mulţimea funcţiilor ψ din $\mathfrak{L}_k^2(D)$ pentru care

(5.44) $\partial_{\vec{n}}^i\psi|_{\partial D}=0$, *cu* $i=\overline{0,k-1}$,

unde $\partial_{\vec{n}}^i$ reprezintă derivata de ordinul i în sensul normalei exterioare la ∂D.

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Revenind la subiectul principal al discuţiei noastre, să începem cu

(i) *Operatorul coordonată* $\hat{x}^i$

Considerând ca spaţiu funcţional "de bază" spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(D)$ şi lucrând, pentru a da un caracter mai concret analizei, în spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^3$ cu reperul cartezian $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$, operatorul coordonată $\hat{x}^i$ se defineşte în acord cu relaţia (IV.6.20.a) prin

(5.45) $\hat{x}^i\psi(\vec{x}) = x^i\psi(\vec{x})$, $(\forall)\ \psi \in E(\hat{x}^i) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Condiţia ca domeniul de valori $R(\hat{x}^i)$ ale operatorului $\hat{x}^i$ să fie în $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ este esenţială, deoarece selectează practic subspaţiul $E(\hat{x}^i)$ din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ pe care poate fi definit operatorul coordonată $\hat{x}^i$. Rezultă astfel, din (5.45), că domeniul de definiţie $E(\hat{x}^i)$ al lui $\hat{x}^i$ este reprezentat de "submulţimea de funcţii $\psi(\vec{x}): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, pentru care funcţiile $\varphi_{(i)}(\vec{x}): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, definite prin,

(5.46) $$\varphi_{(i)}(\vec{x}) = x^i\psi(\vec{x}),$$

sunt pătratic integrabile pe spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^3$."

Adică,

(5.47) $$E(\hat{x}^i) = \left\{ \psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \,|\, \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi_{(i)}(\vec{x})|^2 d^3x = \|\varphi_{(i)}\|^2 < \infty \right\}.$$

Pentru a ne face o idee mai clară despre "natura" funcţiilor din $E(\hat{x}^i)$, să trecem, prin intermediul transformatei Fourier

(5.48) $\psi(\vec{x}) = \dfrac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int\limits_{K^3} \psi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} d^3p$, $\psi(\vec{p}) \in \mathcal{L}^2(K^3)$,

în spaţiul K^3 al impulsurilor şi să investigăm "aici" proprietăţile amplitudinilor Fourier $\psi(\vec{p})$ care asigură $\psi \in E(\vec{x}^i)$. Din (5.46) şi (5.48), obţinem

$$\varphi_{(i)}(\vec{x}) = (2\pi)^{-3/2} \frac{1}{i} \left\{ \int\limits_{K^3} \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\psi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \right] d^3p - \int\limits_{K^3} \frac{\partial \psi(\vec{p})}{\partial p_i} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} d^3p \right\},$$

adică

(5.49) $\varphi_{(i)}(\vec{x}) = -\dfrac{i}{(2\pi)^{3/2}} \int\limits_{\partial K^3} \psi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} d\Sigma_i + \dfrac{i}{(2\pi)^{3/2}} \int\limits_{K^3} \dfrac{\partial \psi(\vec{p})}{\partial p_i} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} d^3p$

unde $d\Sigma_i = \dfrac{1}{2} \varepsilon_{ijk} dp^j \wedge dp^k$ ($\wedge$ fiind produsul exterior) este componenta i a elementului vectorizat de suprafaţă $d\vec{\Sigma}$ din spaţiul K^3. Cum K^3 nu este compact, frontiera sa se află la infinit, adică $|\vec{p}| \to \infty$, şi deci amplitudinea Fourier $\psi(\vec{p})$ trebuie să satisfacă o primă condiţie esenţială

(5.50) $\psi(\vec{p})|_{\partial K^3} = \lim\limits_{|\vec{p}| \to \infty} \psi(\vec{p}) \equiv 0$.

Astfel, practic indiferent de comportarea celei de-al doilea termen din (5.49), funcţia $\varphi_{(i)}(\vec{x})$ nu ar fi pătratic integrabilă pe $\mathbb{R}^3$. In consecinţă, rezultă din (5.49) şi (5.50) că $\varphi_{(i)}(\vec{x})$ este în mod necesar de forma

(5.51) $\varphi_{(i)}(\vec{x}) = \dfrac{i}{(2\pi)^{3/2}} \int\limits_{K^3} d^3p e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \dfrac{\partial}{\partial p_i} \psi(\vec{p})$.

Impunând lui $\varphi_{(i)}(\vec{x})$ dat de (5.51) condiţia de a fi pătratic integrabil (pe $\mathbb{R}^3$), obţinem

$$\left\|\varphi_{(i)}(\vec{x})\right\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \left|\varphi_{(i)}(\vec{x})\right|^2 d^3x =$$

(5.52)

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{K^3 x K^3} \frac{\partial \psi^*(\vec{p}')}{\partial p_i'} \frac{\partial \psi(\vec{p})}{\partial p_i} e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}} d^3p' d^3p d^3x,$$

de unde rezultă

(5.53) $$\left\|\varphi_{(i)}(\vec{x})\right\|^2 = \int_{K^3 x K^3} \frac{\partial \psi^*(\vec{p}')}{\partial p_i'} \frac{\partial \psi(\vec{p})}{\partial p_i} \delta(\vec{p}'-\vec{p}) d^3p' d^3p,$$

adică, în baza proprietăţii de filtraj a funcţiei δ-*Dirac*, integrala

(5.54) $$\left\|\varphi_{(i)}(\vec{x})\right\|^2 = \int_{K^3} \left|\frac{\partial \psi}{\partial p_i}\right|^2 d^3p$$

trebuie să fie mărginită pentru ca $\varphi_{(i)} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, deci

(5.55) $$\left\|\frac{\partial \psi}{\partial p_i}\right\|^2 = \int_{K^3} \left|\frac{\partial \psi}{\partial p_i}\right|^2 d^3p < \infty.$$

Din relaţiile (5.48), (5.50), (5.55) şi teorema Sobolev 5.20 ajungem la concluzia că

"domeniul de definiţie (5.47) a operatorului coordonată $\hat{x}^i$ în spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ este reprezentat de funcţiile $\psi(\vec{x})$ ale căror amplitudini Fourier $\psi(\vec{p})$ aparţin spaţiului Sobolev restricţionat (hilbertian) ${}_o\mathcal{L}_1^2(K^3) \subset \mathcal{L}^2(K^3)$".

Cu domeniul $E(\hat{x}^i)$ precizat, are sens să verificăm liniaritatea operatorului $\hat{x}^i$ şi proprietăţile sale de hermiticitate, simetrie şi autoadjunctivitate. In adevăr, proprietatea de liniaritate este evidentă deoarece, oricare ar fi funcţiile $\psi, \varphi \in E(\hat{x}^i)$ şi scalarii $a, b \in \mathbb{C}$, avem

BCU ASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\hat{x}^i(a\psi + b\varphi) = x^i(a\psi + b\varphi) = \tag{5.56}$$
$$= ax^i\psi + bx^i\varphi = a\hat{x}^i\psi + b\hat{x}^i\varphi .$$

De asemenea, este evidentă hermiticitatea operatorului $\hat{x}^i$

$$(\psi, \hat{x}^i\varphi) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* x^i \varphi \, d^3x = \int_{\mathbb{R}^3} (x^i\psi)^* \varphi \, d^3x = (\hat{x}^i\psi, \varphi), \tag{5.57}$$
$$(\forall)\, \psi, \varphi \in E(\hat{x}^i).$$

Peste proprietatea de simetrie $(\hat{x}^j)^+ = x^j = \hat{x}^j$ cu $E((\hat{x}^j)^+) \supseteq E(\hat{x}^j)$, putem "sări", deoarece vom demonstra unitaritatea operatorului Cayley asociat $\hat{K}^j = (\hat{x}^j - i)(\hat{x}^j + i)^{-1}$, ceea ce asigură, în baza teoremei 5.15, direct proprietatea de autoadjunctivitate a operatorului $\hat{x}^j$.

In adevăr, utilizând relaţia de definiţie (5.45), avem

$$(\hat{x}^j + i)\psi = (x^j + i)\psi \ , \ (\forall)\, \psi \in E(\hat{x}^j) \tag{5.58}$$

şi cum $\{x^j\}_{j=\overline{1,3}}$ sunt reale, rezultă implicaţia

$$(\hat{x}^j + i)\psi = 0 \Rightarrow \psi = 0, \tag{5.59}$$

adică există inversul $(\hat{x}^j + i)^{-1}$ al operatorului $(\hat{x}^j + i)$ şi "acţionând cu el din stânga relaţiei (5.58)" obţinem în mod concret

$$(\hat{x}^j + i)^{-1}\varphi = \frac{1}{x^j + i}\varphi \ , \ (\forall)\ [\varphi = (x^j + i)\psi] \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), \tag{5.60}$$

când ψ "parcurge" tot domeniul $E(\hat{x}^i)$. Rezultă astfel că domeniul de definiţie al operatorului Cayley asociat $\hat{K}^j$ este întregul spaţiu Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) = R(\hat{x}^j + i)$ şi aceeaşi proprietate o are domeniul său de valori $R(\hat{x}^j - i)$ deoarece, în mod evident,

$$\frac{1}{x^j + i}\varphi = \frac{1}{x^j + i}(x^j + i)\psi = \psi \tag{5.61}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

este din $E(\hat{x}^j)$ iar vectorul

(5.62) $\tilde{\varphi} = (\hat{x}^j - i)\psi = (x^j - i)\psi$,

care aparţine lui $R(\hat{K}^j) = R(x^j - i)$, parcurge tot spaţiul $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ când ψ "ia toate valorile" din $E(\hat{x}^j)$. Deci $R(\hat{K}^j) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Mai rămâne să arătăm, în baza definiţiei 5.2, aplicând teorema 5.1, că operatorul Cayley $\hat{K}^j$ este izometric, fiindcă astfel el va fi "automat" şi unitar. Pentru orice $\varphi \in E(\hat{K}^j) = R(\hat{x}^j + i) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ avem

$$\|\hat{K}^j \varphi\|^2 = (\hat{K}^j \varphi, \hat{K}^j \varphi) =$$

(5.63)
$$= \int_{\mathbb{R}^3} \left[(\hat{x}^j - i)\left(\frac{\varphi}{x^j + i} \right) \right]^* \left[(\hat{x}^j - i)\left(\frac{\varphi}{x^j + i} \right) \right] d^3x,$$

ceea ce înseamnă

$$\|\hat{K}^j \varphi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{x^j - i}{x^j + i} \varphi \right)^* \left(\frac{x^j - i}{x^j + i} \varphi \right) d^3x =$$

(5.64)
$$= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|x^j - i|^2}{|x^j + i|^2} |\varphi|^2 d^3x = \|\varphi\|^2,$$

deci $\hat{K}^j = (\hat{x}^j - i)(\hat{x}^j + i)^{-1}$ este izometric. Din teorema 5.15, $\hat{K}^j$ fiind unitar rezultă că operatorul coordonată $\hat{x}^j$ este operator autoadjunct.

(ii) *Operatorul impuls* $\hat{p}_i$

In aceleaşi "condiţii de lucru" ca la analiza operatorului coordonată, adică spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ca "spaţiu de bază" şi utilizarea reprezentării de configuraţie în coordonate carteziene $\{x^i\}_{i=\overline{1,3}}$,

operatorul impuls $\hat{p}_i$ se defineşte în acord cu relaţia (IV.6.16.a) prin

(5.65) $\hat{p}_i\psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x^i}$, $(\forall)\ \psi(\vec{x}) \in E(\hat{p}_i) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

De data aceasta, stabilirea într-o primă etapă a domeniului de definiţie $E(\hat{p}_i)$ este practic evidentă, deoarece, funcţiile $\hat{p}_i\psi(\vec{x})$ date de (5.65) trebuind să fie din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ne conduc la relaţia

(5.66)
$$\|\hat{p}_i\psi\| = \hbar^2\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\partial\psi^*}{\partial x^i}\frac{\partial\psi}{\partial x^i}d^3x = \\ = \hbar^2\int_{\mathbb{R}^3}\left|\frac{\partial\psi}{\partial x^i}\right|^2 d^3x = \hbar^2\left\|\frac{\partial\psi}{\partial x^i}\right\|^2 < \infty,$$

din care, având în vedere definiţia 5.9 şi faptul că $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, deducem că domeniul de definiţie $E(\hat{p}_i)$ a operatorului impuls este sigur inclus, (sau cel mult egal) în (cu) spaţiul Sobolev $\mathcal{L}^2_1(\mathbb{R}^3)$. Intr-o a doua etapă, pentru a stabili exact domeniul $E(\hat{p}_i)$, trebuie să analizăm direct hermiticitatea operatorului $\hat{p}_i$. In acest sens avem

(5.67)
$$(\psi, \hat{p}_i\varphi) = \int_{\mathbb{R}^3}\psi^*(\vec{x})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}\varphi(\vec{x})d^3x = \\ = \int_{\mathbb{R}^3}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}[\psi^*\varphi]d^3x - \frac{\hbar}{i}\int_{\mathbb{R}^3}\frac{\partial\psi^*}{\partial x^i}\varphi d^3x,$$

adică

$$(\psi, \hat{p}_i\varphi) = \int_{\partial\mathbb{R}^3}\frac{\hbar}{i}\psi^*\varphi\, dS_i + \int_{\mathbb{R}^3}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}\psi(\vec{x})\right]^*\varphi(\vec{x})d^3x$$

BCU IASI / CENTRUL UNIVERSITAR IBRAIU

şi deci

$$(5.68)\quad \left(\psi,\hat{p}_i\varphi\right)=\left(\hat{p}_i\psi,\varphi\right)+\frac{\hbar}{i}\int_{\partial\mathbb{R}^3}\psi^*(\vec{x})\varphi(\vec{x})dS_i,$$

unde prin $dS_i=\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}dx^j\wedge dx^k$ am notat componenta i a elementului de suprafaţă vectorizat $d\vec{S}$ ($\text{din}\,\mathbb{R}^3$), iar funcţiile ψ,φ le-am considerat arbitrare din $E(\hat{p}_i)\subseteq\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$.

Inspectând relaţia (5.68), observăm că hermiticitatea operatorului impuls este distrusă dacă domeniul său de definiţie conţine funcţii care nu verifică la frontieră condiţia

$$(5.69)\quad \psi(\vec{x})\big|_{\partial\mathbb{R}^3}=\lim_{|\vec{x}|\to\infty}\psi(\vec{x})\equiv 0.$$

Din (5.69), (5.66) şi (5.65), aplicând teorema Sobolev 5.20 obţinem că

domeniul de definiţie al operatorului impuls $\hat{p}_i$, în spaţiul Hilbert $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$, este spaţiul Sobolev restricţionat ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$, adică (în transcriere "simbolică") $E(\hat{p}_i)={}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)\subset\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Rezultă, în acelaşi timp, că, pe domeniul său de definiţie, operatorul impuls $\hat{p}_i=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}$ este hermitic

$$(5.70)\quad \left(\psi,\hat{p}_i\varphi\right)=\left(\hat{p}_i\psi,\varphi\right)\ ,\ (\forall)\ \psi,\varphi\in E(\hat{p}_i)={}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3).$$

Din punct de vedere analitic, fiind un operator de derivare, liniaritatea operatorului impuls este evidentă

$$\hat{p}_i(a\psi+b\varphi)=a\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x^i}\right)+b\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x^i}\right)=$$

$$=a\hat{p}_i\psi+b\hat{p}_i\varphi\,,(\forall)\ \psi,\varphi\in{}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3),a,b\in\mathbb{C}.$$

La fel ca în cazul operatorului coordonată, vom "sări" peste

proprietatea de simetrie $\hat{p}_i^+=\hat{p}_i$ pe $E(\hat{p}_i^+)\supset E(\hat{p}_i)$, şi vom arăta direct, aplicând criteriul Cayley (teorema 5.15), că operatorul impuls este autoadjunct, deoarece operatorul Cayley asociat $\hat{K}_i=(\hat{p}_i-i)(\hat{p}_i+i)^{-1}$ este unitar. Pentru a nu ne încurca în unităţi de măsură, vom lucra în "unităţi naturale" adică (în acest caz) $\hbar=1$.

In această etapă, spre deosebire de analoaga ei de la cazul operatorului coordonată, unde acţiunea operatorului Cayley $\hat{K}^j$ putea fi explicitată direct în reprezentarea de configuraţie, aici calculele, şi sesizarea aspectelor de principiu, sunt ceva mai complicate, deoarece acţiunea operatorilor $(\hat{p}_i\pm i),(\hat{p}_i\pm i)^{-1}$ şi $\hat{K}_i$ este "permanent intermediată" de transformata Fourier a funcţiilor din ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$ şi $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Fie deci

$$(5.71)\quad \psi(\vec{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\psi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}\,d^3p$$

un element din ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$ şi să vedem pe scurt ce condiţii satisfac amplitudinile Fourier $\psi(\vec{p})$ în acest caz. In primul rând, din condiţia $\psi(\vec{x})\in\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ (deoarece ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)\subset\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$) rezultă

$$(5.72)\quad \begin{aligned}\|\psi(\vec{x})\|^2&=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{K^3xK^3}\psi^*(\vec{p}')\psi(\vec{p})e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}}\,d^3p'd^3p\,d^3x=\\&=\int_{K^3xK^3}\psi^*(\vec{p}')\psi(\vec{p})\delta(\vec{p}'-\vec{p})d^3p'd^3p=\|\psi(\vec{p})\|^2<\infty,\end{aligned}$$

adică, aşa cum era de aşteptat, în virtutea teoremei lui Plancherel, amplitudinele $\psi(\vec{p})$ sunt pătratic integrabile pe K^3, $\psi(\vec{p})\in\mathfrak{L}^2(K^3)$. In al doilea rând, din condiţia $\psi(\vec{x})\in\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$ (căci ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)\subset\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$) obţinem

BCU IAŞI - CENTRALA UNIVERSITARĂ

$$(5.73)\quad \left\|\frac{\partial\psi}{\partial x^i}\right\|^2 = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbb{R}^3}\int_{K^3\times K^3} p_i' p_i \psi^*(\vec{p}')\psi(\vec{p})\, e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{x}}\, d^3p'\, d^3p\, d^3x =$$
$$= \int_{K^3\times K^3} p_i' p_i \psi^*(\vec{p}')\psi(\vec{p})\,\delta(\vec{p}'-\vec{p})\, d^3p'\, d^3p = \|p_i\psi(\vec{p})\|^2 < \infty,$$

adică, de această dată, în locul funcţiilor $\varphi_{(i)}(\vec{x}) = x^i\psi(\vec{x})$ avem funcţiile $\varphi_{(i)}(\vec{p}) = p_i\psi(\vec{p})$: $K^3 \to \mathbb{C}$, care sunt din $\mathcal{L}^2(K^3)$. Având în vedere şi condiţia (5.69), care este complet analoagă condiţiei (5.50), ajungem la concluzia că "sub aspect funcţional" amplitudinile Fourier $\psi(\vec{p})$ ale funcţiilor $\psi(\vec{x}) \in {}_0\mathcal{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$ sunt chiar elementele domeniului de definiţie $E(\hat{x}^i)$ reprezentat cartezian pe K^3 (în loc de $\mathbb{R}^3$ cum era în cazul (i) al operatorului coordonată).

Prin urmare, aplicând acest artificiu, am obţinut următorul rezultat care ne va permite să demonstrăm imediat autoadjunctivitatea operatorului impuls:

"Dacă pe $E(\hat{x}^i)$, în reprezentare $\mathbb{R}^3$, operatorul $\hat{x}^i$ acţionează conform relaţiei sale de definiţie (5.45), atunci (şi) operatorul impuls $\hat{p}_i$ va acţiona pe $E(\hat{x}^i)$ în reprezentare K^3 (adică peste amplitudinile Fourier $\psi(\vec{p})$ ale funcţiilor din ${}_0\mathcal{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$ exact prin aceeaşi relaţie, adică

$$(5.74)\quad \hat{p}_i\psi(\vec{p}) = p_i\psi(\vec{p}) \ , \ (\forall)\ \psi(\vec{p}) \in E(\hat{x}^i)$$

în reprezentarea K^3".

Din (5.74) deducem

$$(5.75)\quad (\hat{p}_i + i)\psi(\vec{p}) = (p_i + i)\psi(\vec{p}).$$

Deoarece

(5.76) $(\hat{p}_i+i)\psi(\vec{p})=0 \rightarrow \psi(\vec{p})=0$,

operatorul $(\hat{p}_i+i)$ este inversabil, iar inversul său, $(\hat{p}_i+i)^{-1}$, acţionează asupra funcţiilor

(5.77) $\varphi(\vec{p})=(p_i+i)\psi(\vec{p})$

din $\mathfrak{L}^2(K^3)$ în acord cu relaţia

(5.78) $(\hat{p}_i+i)^{-1}\varphi(\vec{p})=\dfrac{\varphi(\vec{p})}{p_i+i}$,

complet similară relaţiei (5.60) corespunzătoare acţiunii lui $(\hat{x}^i+i)^{-1}$ asupra funcţiilor $\varphi(\vec{x})$ din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Cum

(5.79) $\hat{K}_i=(\hat{p}_i-i)(\hat{p}_i+i)^{-1}$,

avem relaţia $E(\hat{K}_i)=R(\hat{p}_i+i)=\mathfrak{L}^2(K^3)$ şi obţinem, utilizând (5.78), că acţiunea operatorului Cayley (5.79) pe $\mathfrak{L}^2(K^3)$ este dată de

(5.80) $\hat{K}_i\varphi(\vec{p})=\dfrac{p_i-i}{p_i+i}\varphi(\vec{p})$,

adică domeniul său de valori $R(\hat{K}_i)$ este întregul spaţiu $\mathfrak{L}^2(K^3)$. Demonstraţia faptului că operatorul Cayley $\hat{K}_i$ este izometric pe $\mathfrak{L}^2(K^3)$ decurge exact la fel cu cea din cazul operatorului $\hat{K}^j$ asociat operatorului coordonată $\hat{x}^j$ adică

(5.81) $$\left\|\hat{K}_i\varphi(\vec{p})\right\|^2=\int_{K^3}\left[\frac{p_i-i}{p_i+i}\varphi(\vec{p})\right]^*\cdot\left[\frac{p_i-i}{p_i+i}\varphi(\vec{p})\right]d^3p=$$
$$=\int_{K^3}|\varphi(\vec{p})|^2d^3p=\|\varphi(\vec{p})\|^2$$

şi în virtutea teoremei Plancherel (5.72) rezultă unitaritatea lui $\hat{K}_i$, atât

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pe $\mathfrak{L}^2(K^3)$, cât şi pe $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$, ceea ce înseamnă în definitiv, prin teorema 5.15, că operatorul impuls $\hat{p}_i=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}$ este autoadjunct pe domeniul său de definiţie ${}_0\mathfrak{L}^2_1(\mathbb{R}^3)$.

După cum se observă, comentariul efectuat după obţinerea formulei (5.73) ne-a condus la relaţiile (5.80) şi (5.81) într-un mod deosebit de natural, având acelaşi grad de complexitate cu cel utilizat la studiul operatorului coordonată. Deoarece puţin mai înainte spuneam că "situaţia de ansamblu" la studiul autoadjunctivităţii operatorului impuls va fi ceva mai dificilă decât în cazul operatorului coordonată, suntem datori (cel puţin faţă de cititorul mai puţin iniţiat în domeniu) cu o explicaţie: cauza acestei reduceri de complexitate şi a existenţei unei analogii complete între cele două metode utilizate la studiul operatorilor coordonată şi impuls constă în faptul că, de fiecare dată, am lucrat în reprezentările proprii celor doi operatori, adică, în reprezentarea de configuraţie $\mathbb{R}^3$ pentru operatorul coordonată şi în reprezentarea de impuls K^3 pentru operatorul impuls.

Pentru a sesiza mai bine "cum se schimbă problema" dacă nu aplicăm acest artificiu, să prezentăm şi calculele necesare demonstrării autoadjunctivităţii impulsului, efectuate în reprezentarea de configuraţie $\mathbb{R}^3$, în locul celei proprii K^3.

Astfel, din (5.70) şi (5.65), obţinem (cu $\hbar=1$)

$$(\hat{p}_i+i)\psi(\vec{x})=\left[\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}+i\right]\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\psi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p\right\}= \tag{5.82}$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}(p_i+i)\psi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p,$$

oricare ar fi $\psi(\vec{x})\in{}_0\mathfrak{L}^2_1(\mathbb{R}^3)$ dat de transformata Fourier (5.70). Cum din

relaţia (5.73) ştim că funcţiile (5.77) sunt din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$, rezultă imediat că integrala din dreapta relaţiei (5.82) este o funcţie din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ deci $(\hat{p}_i+i):{}_0\mathfrak{L}^2_1(\mathbb{R}^3)\to\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi $(\hat{p}_i+i)^{-1}:\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)\to{}_0\mathfrak{L}^2_1(\mathbb{R}^3)$. Cu totul analoagă relaţiei (5.82), avem pentru $(\hat{p}_i-i)$ relaţia

$$(\hat{p}_i-i)\psi(\vec{x})=\left[\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}-i\right]\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\psi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\vec{x}}d^3p\right\}= \tag{5.83}$$
$$=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}(p_i-i)\psi(\vec{p})e^{i\vec{p}\vec{x}}d^3p,$$

adică $(\hat{p}_i-i):{}_0\mathfrak{L}^2_1(\mathbb{R}^3)\to\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Am justificat astfel că dacă operatorul $(\hat{p}_i+i)^{-1}$ există, atunci operatorul Cayley asociat lui $\hat{p}_i$ acţionează pe tot spaţiul $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi ia valori în tot spaţiul $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Că $(\hat{p}_i+i)^{-1}$ există, este evident din (5.82), deoarece

$$(\hat{p}_i+i)\psi(\vec{x})=0\ \leftrightarrow\ \int_{K^3}(p_i+i)\psi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\vec{x}}d^3p=0\ \Rightarrow\ \psi(\vec{p})=0$$

şi deci

$$(\hat{p}_i+i)\psi(\vec{x})=0\ \Rightarrow\ \psi(\vec{x})=0. \tag{5.84}$$

Obţinerea în reprezentarea de configuraţie a modului de acţiune a lui $(\hat{p}_i+i)^{-1}$ se face în felul următor : ştiind că $(\hat{p}_i+i)^{-1}$ există, îl aplicăm din stânga întregii relaţii (5.82) şi avem

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\psi(\vec{p})\,e^{i\vec{p}\vec{x}}d^3p= \tag{5.85}$$
$$=(\hat{p}_i+i)^{-1}\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}(p_i+i)\psi(\vec{p})e^{i\vec{p}\vec{x}}d^3p\right\}.$$

Utilizând (5.77), expresia (5.85) capătă forma

BCUIAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(\hat{p}_i+i)^{-1}\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\varphi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p\right\}=$$

(5.86)

$$=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\frac{\varphi(\vec{p})}{p_i+i}e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p$$

care defineşte acţiunea lui $(\hat{p}_i+i)^{-1}$ asupra funcţiilor $\varphi(\vec{x})\in\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ în reprezentarea de configuraţie. Acţionând peste tot în (5.86) din stânga cu operatorul $(\hat{p}_i-i)$ obţinem

$$(\hat{p}_i-i)(\hat{p}_i+i)^{-1}\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\varphi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p\right\}=$$

(5.87)

$$=\hat{K}_i\varphi(\vec{x})=(\hat{p}_i-i)\left\{\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\frac{\varphi(\vec{p})}{p_i+i}e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p\right\}=$$

$$=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\frac{\varphi(\vec{p})}{p_i+i}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}-i\right)e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p$$

adică rezultă relaţia

(5.88) $$\hat{K}_i\varphi(\vec{x})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int_{K^3}\frac{p_i-i}{p_i+i}\varphi(\vec{p})e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}d^3p,$$

care exprimă acţiunea operatorului Cayley (asociat impulsului $\hat{p}_i$) asupra funcţiilor din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$, în termenii reprezentării de configuraţie. Mai avem de arătat, utilizând (5.88), că operatorul $\hat{K}_i$ este izometric. In adevăr, aplicând condiţiile teoremei 5.1, avem expresiile

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\left\|\hat{K}_i\varphi(\vec{x})\right\|^2 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int\limits_{\mathbb{R}^3x\mathbb{K}^3x\mathbb{K}^3} \frac{p_i'+i}{p_i'-i}\varphi^*(\vec{p}') \cdot \frac{p_i-i}{p_i+i}\varphi(\vec{p})\, e^{-i(\vec{p}'-\vec{p})\cdot\vec{x}} d^3p'd^3pd^3x =$$

(5.89)
$$= \int\limits_{\mathbb{K}^3x\mathbb{K}^3} \frac{p_i'+i}{p_i'-i}\frac{p_i-i}{p_i+i}\varphi^*(\vec{p}')\varphi(\vec{p})\,\delta(\vec{p}'-\vec{p})\,d^3p'd^3p =$$
$$= \int\limits_{\mathbb{K}^3} |\varphi(\vec{p})|^2 d^3p = \int\limits_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\vec{x})|^2 d^3x = \|\varphi(\vec{x})\|^2$$

care demonstrează că operatorul $\hat{K}_i$ este izometric şi, deoarece $E(\hat{K}_i)=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, el este şi unitar (definiţia 5.2), ceea ce confirmă prin teorema 5.15 că operatorul impuls $\hat{p}_i$ este autoadjunct.

(iii) *Operatorul Hamilton-Schrödinger*

Aşa precum am văzut la punctul b. al paragrafului IV.6, aplicând hamiltonianului clasic (IV.6.33) Principiul de Corespondenţă, am obţinut operatorul Hamilton (IV.6.36)

(5.90) $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{x},t) = \frac{1}{2m_0}\delta^{ik}\hat{p}_i\hat{p}_k + \hat{V}(\vec{x},t)$$

pentru particula scalară, nerelativistă, în câmpuri simplu-potenţiale. In expresia (5.90), care este dată în reprezentarea de configuraţie, pe lângă componentele operatorului vectorial al impulsului

(5.91) $$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla,$$

"apare" şi operatorul potenţialului simplu definit formal prin expresia

(5.92) $\hat{V}(\vec{x},t) = V(\vec{x},t)$, *cu* $V:\mathbb{R}^3x\mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$,

sau, în mod mai exact, prin relaţia

(5.93) $\hat{V}(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t) = V(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t)$, $(\forall)\ \Psi(\vec{x},t):\mathbb{R}^3x\mathbb{R}\to\mathbb{C}$.

Am spus "în mod mai exact" şi nu "în mod exact", deoarece,

dacă $\Psi(\vec{x},t)$, trebuind să aibă semnificaţie fizică, este în principiu la orice moment t o funcţie din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, stabilirea unor condiţii cât mai generale, şi în acelaşi timp reale sub aspect fizic, care, impuse unei clase cât mai largi de potenţiale $V(\vec{x},t)$, să conducă la apartenenţa în orice moment a funcţiilor $V(\vec{x},t)\cdot\Psi(\vec{x},t)$ la spaţiul Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi să asigure caracterul autoadjunct al operatorului $\hat{V}(\vec{x},t)$, este o problemă deosebit de complicată, care ocupă un loc central în teoria perturbaţiilor (în Mecanica Cuantică) şi în teoria difuziei câmpurilor cuantice, studiată într-un cadru foarte avansat (sub aspectul formalismului matematic) în Teoria Cuantică a Câmpurilor.

Din acest motiv, ne vom limita în cele ce urmează la cazul potenţialelor conservative $V(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$, care permit definirea suficient de riguroasă a operatorului energiei potenţiale $V(\vec{x})$ prin relaţiile:

(5.94)

a) $$\hat{V}(\vec{x})\psi(\vec{x})=V(\vec{x})\psi(\vec{x}) \ , \ (\forall)\ \psi\in E(\hat{V})\subseteq\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$$

b) $$E(\hat{V})=\left\{\psi(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}\ \middle|\ \int\limits_{\mathbb{R}^3}|V(\vec{x})\psi(\vec{x})|^2d^3x=\|V\psi\|^2<\infty\right\}.$$

In mod corespunzător, utilizând relaţia de definiţie (5.91) a operatorului vectorial al impulsului, obţinem expresia operatorului Hamilton-Schrödinger

(5.95) $$\hat{H}_s=\frac{1}{2m_0}\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}+\hat{V} \ ,$$

cu $\hat{V}$ definit de (5.94), care în reprezentare ca operator liniar diferenţial de ordinul II, se scrie evident

(5.96) $$\hat{H}_s=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta+V(\vec{x}).$$

Dat fiind că funcţia energie potenţială $V(x)$ poate să aibă teoretic

o formă foarte generală, suntem nevoiţi să-i restricţionăm această "proprietate" impunându-i o serie de condiţii suplimentare, dar fizic rezonabile, care să confere discuţiei noastre un cadru matematic suficient de bine precizat. In acest sens, prima condiţie pe care o impunem şi care este logic naturală, fiindcă altfel nu am avea ce să analizăm, este $E(\hat{V})\neq\varnothing$. Această condiţie este suficientă pentru a-i asigura operatorului $\hat{V}$, dat de (5.94), proprietăţile de liniaritate şi hermiticitate. In adevăr, oricare ar fi $\psi,\varphi\in E(\hat{V})$ şi $a,b\in\mathbb{C}$, avem

$$\hat{V}(a\psi+b\varphi)=V(\vec{x})[a\psi(\vec{x})+b\varphi(\vec{x})]=aV(\vec{x})\psi(\vec{x})+bV(\vec{x})\varphi(\vec{x}),$$

adică

(5.97) $\hat{V}(a\psi+b\varphi)=a\hat{V}\psi+b\hat{V}\varphi$,

şi respectiv,

$$(\psi,\hat{V}\varphi)=\int_{\mathbb{R}^3}\psi^*(\vec{x})(V(\vec{x})\varphi(\vec{x}))d^3x=$$

(5.98)

$$=\int_{\mathbb{R}^3}(V(\vec{x})\psi(\vec{x}))^*\varphi(\vec{x})d^3x=(\hat{V}\psi,\varphi),$$

unde existenţa integralelor din (5.98) este asigurată de faptul că, în acord cu (5.94.b), $E(\hat{V})\subseteq\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi $R(\hat{V})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

A doua condiţie suplimentară provine direct din teorema 5.6, deoarece $\hat{V}$ fiind liniar şi hermitic, este suficient să impunem ca domeniul său de definiţie să fie dens în $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, adică $\overline{E}(\hat{V})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, pentru ca $\hat{V}$ să fie simetric, adică $\hat{V}^+\supseteq\hat{V}$. Dacă utilizăm relaţia de definiţie a operatorului adjunct $\hat{V}^+$, anume

(5.99) $(\hat{V}^+\psi,\varphi)=(\psi,\hat{V}\varphi)$, cu $\psi\in E(\hat{V}^+)$ şi $(\forall)\,\varphi\in E(\hat{V})$,

observăm, explicitând-o în reprezentare de configuraţie

(5.100) $$\int_{\mathbb{R}^3}(\hat{V}^+\psi)^*\varphi\,d^3x=\int_{\mathbb{R}^3}\psi^*(V\varphi)\,d^3x=\int_{\mathbb{R}^3}(V\psi)^*\varphi\,d^3x,$$

că integrala din mijloc există oricare ar fi $\psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi deci, am putea impune, în cel mai simplu caz, ca $(V\psi)\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, pentru orice $\psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, ceea ce înseamnă de fapt $E(\hat{V}^+)=E(\hat{V})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi atunci, în baza teoremei 5.7 (Hellinger-Toeplitz), obţinem imediat că operatorul energie potenţială, definit prin relaţia (5.94) cu $E(\hat{V})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, este autoadjunct şi mărginit. Deşi simplu sub aspect matematic, acest rezultat este deosebit de important din punct de vedere fizic, deoarece conduce la următoarea concluzie:

"pentru orice microparticulă nerelativistă, supusă acţiunii unui câmp conservativ de potenţial măsurabil şi mărginit, i se poate asocia energiei potenţiale a acesteia $V(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$ un operator autoadjunct $\hat{V}$, definit pe întregul spaţiu Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ al funcţiilor de stare".

Cu toate că potenţialele măsurabile şi mărginite reprezintă o clasă destul de largă, corespunzătoare unui număr apreciabil de sisteme fizice, ea nu include totuşi o serie de câmpuri conservative fundamentale, sub aspect experimental şi teoretic, cum sunt de exemplu potenţialele centrale cu divergenţă în origine, sau, câmpurile potenţiale nemărginite la infinitul spaţial. In astfel de situaţii, pentru a stabili autoadjunctivitatea operatorului simetric al energiei potenţiale, vom apela din nou la criteriul lui Cayley. Observăm mai întâi, că operatorul $(\hat{V}+i):E(\hat{V})\to R(\hat{V}+i)\subseteq\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ este inversabil deoarece ecuaţia

$$(\hat{V}+i)\chi=(V+i)\chi=0,\ \text{cu}\ \chi\in E(\hat{V}),$$

nu admite decât soluţia banală $\chi=0$. Determinarea formei concrete (în raport cu funcţia $V(\vec{x})$ a energiei potenţiale) a operatorului invers

$(\hat{V}+i)^{-1}$ o efectuăm cu totul analog metodei utilizate pentru $(\hat{x}+i)^{-1}$ adică, din ecuaţia

$$(\hat{V}+i)\psi=(V+i)\psi=\varphi\,,\ \text{cu}\ \psi\in E(\hat{V})\ \text{şi}\ \varphi\in R(\hat{V}+i)\subseteq \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3),$$

rezultă

$$\psi=(\hat{V}+i)^{-1}[(V+i)\psi]=(\hat{V}+i)^{-1}\varphi$$

şi deci

$$\text{a)}\qquad (\hat{V}+i)^{-1}\varphi=\frac{\varphi}{V+i}\ ,\ (\forall)\,\varphi\in R(\hat{V}+i)\subseteq \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3),$$

(5.101)

$$\text{b)}\qquad \psi=\frac{\varphi}{V+i}\,.$$

Din relaţia (5.101.b) obţinem imediat că atât ψ cât şi $\hat{V}\psi$ sunt pătratic integrabile pe $\mathbb{R}^3$ pentru orice $\varphi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, adică

$$\text{a)}\qquad \|\psi\|^2=\int_{\mathbb{R}^3}\frac{|\varphi(\vec{x})|}{V^2(\vec{x})+1}d^3x\ \le\ \int_{\mathbb{R}^3}|\varphi(\vec{x})|^2d^3x<\infty,$$

(5.102)

$$\text{b)}\qquad \|\hat{V}\psi\|^2=\int_{\mathbb{R}^3}\frac{V^2(\vec{x})|\varphi(\vec{x})|^2}{V^2(\vec{x})+1}d^3x\le\int_{\mathbb{R}^3}|\varphi(\vec{x})|d^3x<\infty,$$

ceea ce înseamnă că

$$E(\hat{V})=\left\{\psi=\frac{\varphi}{V+i}\ \middle|\ (\forall)\,\varphi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)\right\}\subset\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$$

şi

$$R(\hat{V}+i)=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3),$$

pentru orice $V(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$.

Prin aceeaşi metodă, în cazul operatorului $(\hat{V}-i)$, obţinem relaţiile:

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

a) $(\hat{V}-i)^{-1}\chi=\frac{\chi}{V-i}$, , $(\forall)\ \chi\in R(\hat{V}-i)\subset\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

(5.103)

b) $\sigma=\frac{\chi}{V-i}$, , $(\forall)\ \chi\in R(\hat{V}-i)\subset\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

din care rezultă

a) $\|\sigma\|^2\le\int_{\mathbb{R}^3}|\chi(x)|^2d^3x<\infty$, , $(\forall)\ \chi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

(5.104)

b) $\|\hat{V}\sigma\|^2\le\int_{\mathbb{R}^3}|\chi(x)|^2d^3x<\infty$, , $(\forall)\ \chi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

adică $R(\hat{V}-i)=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ şi deci operatorul Cayley asociat lui $\hat{V}$

(5.105) $\hat{K}=(\hat{V}-i)(\hat{V}+i)^{-1}$

are <u>tot</u> spaţiul $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ ca domeniu de definiţie şi ca domeniu de valori:

a) $E(\hat{K})=R(\hat{V}+i)=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

(5.106)

b) $R(\hat{K})=R(\hat{V}-i)=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Cum proprietatea de izometrie este evidentă,

(5.107) $$\|\hat{K}\varphi\|^2=\int_{\mathbb{R}^3}\left[\frac{V(\vec{x})-i}{V(\vec{x})+i}\varphi(\vec{x})\right]^*\cdot\left[\frac{V(\vec{x})-i}{V(\vec{x})+i}\varphi(x)\right]d^3x=\|\varphi\|^2$$

pentru orice $\varphi\in E(\hat{K})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ (relaţia (5.106.a)), iar $R(\hat{K})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ (relaţia (5.106.b)), rezultă imediat din definiţia 5.2 că operatorul Cayley (5.105) este <u>unitar</u> şi deci, In baza teoremei 5.15, operatorul simetric $\hat{V}$ al energiei potenţiale $V(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$, definit prin relaţiile:

BCU ALEXANDRU IOAN CUZA UNIVERSITY LIBRARY

(5.108)

a) $(\hat{V}\psi)(\vec{x})=V(\vec{x})\psi(\vec{x})$, $(\forall)\ \psi\in E(\hat{V})\subset\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

b) $E(\hat{V})=\{\ \psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)\ |\ \|\hat{V}\psi\|^2<\infty\ \}$, $\overline{E}(\hat{V})=\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

este un operator autoadjunct şi în cazurile în care funcţia V a energiei potenţiale nu este mărginită peste tot în spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^3$.

Trecând la studiul operatorului Hamilton pentru particula liberă (scalară şi nerelativistă)

(5.109) $$\hat{H}_0=\frac{1}{2m_0}\delta^{ik}\hat{p}_i\hat{p}_k \Leftrightarrow \hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta,$$

avem nevoie de următoarea serie de rezultate suplimentare, "mai subtile", din teoria operatorilor liniari în spaţii Hilbert.

Definiţia 5.11. Operatorul liniar $\hat{\underline{A}}$, reprezentând cea mai mică extensie închisă a operatorului liniar $\hat{A}$, se numeşte închiderea lui $\hat{A}$.

Teorema 5.23. Pentrru orice operator simetric $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E, închiderea sa $\hat{\underline{A}}$ există şi coincide cu $\hat{A}^{++}$ adica $\hat{\underline{A}}\equiv\hat{A}^{++}$.

Demonstraţia rezultă imediat din teorema 4.23; cum $\hat{A}$ este simetric $\hat{A}^{+}\supseteq\hat{A}$ şi $\overline{E}(\hat{A}^{+})=E$ fiindcă $\overline{E}(\hat{A})=E$. Ca urmare, $\hat{A}$ posedă $\hat{A}^{++}$ drept cea mai mică extensie închisă şi deci, din definiţia 5.11, rezultă $\hat{\underline{A}}=\hat{A}^{++}$. (q.e.d.)

Definiţia 5.12. Un operator simetric $\hat{A}$ în spaţiul E se numeşte esenţial autoadjunct dacă $\hat{A}^{+}=\hat{A}^{++}$.

Teorema 5.24. Inchiderea $\hat{\underline{A}}=\hat{A}^{++}$ a operatorului esenţial autoadjunct $\hat{A}$ este un operator autoadjunct, adică $\hat{\underline{A}}^{+}\equiv\hat{\underline{A}}$.

Demonstraţia este practic evidentă deoarece, din $\underline{\hat{A}}=\hat{A}^{++}$, rezultă $\underline{\hat{A}}^{+}=(\hat{A}^{++})^{+}$ şi cum $\hat{A}^{+}=\hat{A}^{++}$, obţinem $\underline{\hat{A}}^{+}=(\hat{A}^{+})^{+}=\hat{A}^{++}$, deci $\underline{\hat{A}}^{+}=\underline{\hat{A}}$.

In cadrul Mecanicii Cuantice, sau mai precis al formalismului matematic al acesteia, importanţa definiţiilor 5.11, 5.12 şi a teoremelor 5.23, 5.24 constă în faptul că, după cum vom vedea imediat, atât operatorul Hamilton (5.109), cât şi operatorul Hamilton-Schrödinger (5.96), sunt de fapt operatori esenţiali autoadjuncţi şi nu autoadjuncţi. Pentru a ne convinge de veridicitatea acestei observaţii, să luăm în discuţie forma diferenţială, în reprezentare de configuraţie, a operatorului $\hat{H}_0$ (adică a doua relaţie (5.109)) şi să remarcăm de la început următoarele două aspecte:

- domeniul de definiţie al operatorului

(5.109') $$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta$$

este dat de mulţimea elementelor ψ din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)\cap C^2(\mathbb{R}^3)$ pentru care $\Delta\psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, adică $\|\Delta\psi\|<\infty$, ceea ce înseamnă, utilizând relaţia Poincaré de "acoperire" a normelor corespunzătoare spaţiilor Sobolev de ordine succesive

(5.110) $$\|\cdot\|_k\le\|\cdot\|_{k+1},\ \text{cu}\ \|\cdot\|_k\ \text{pe}\ \mathcal{L}_2^k\ \text{şi}\ \|\cdot\|_{k+1}\ \text{pe}\ \mathcal{L}_{k+1}^2,$$

că $\|\Delta\psi\|\le\|\psi\|_2$, deci domeniul de definiţie al operatorului $\hat{H}_0$ este reprezentat de funcţiile de clasă $C^2(\mathbb{R}^3)$ din $\mathcal{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, adică $E(\hat{H}_0)=\mathcal{L}_2^2(\mathbb{R}^3)\cap C^2(\mathbb{R}^3)$.

- Inspectând condiţia de hermiticitate

(5.111) $$(\hat{H}_0\psi,\varphi)=(\psi,\hat{H}_0\varphi)\ ,\ (\forall)\ \psi,\varphi\in E_0(\hat{H}_0);$$

a operatorului $\hat{H}_0$ observăm că

$$
\begin{aligned}
(\psi, \hat{H}_0\varphi) &= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \nabla\cdot(\nabla\varphi)\, d^3x = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\oint_{\partial\mathbb{R}^3} (\psi^* \nabla\varphi)\cdot d\vec{S} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{\mathbb{R}^3} \nabla\psi^*\cdot\nabla\varphi\, d^3x = \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0}\oint_{\partial\mathbb{R}^3} [\psi^*\nabla\varphi - \varphi\nabla\psi^*]d\vec{S} - \frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{\mathbb{R}^3} (\Delta\psi^*)\varphi\, d^3x = \\
&= \frac{\hbar^2}{2m_0}\oint_{\partial\mathbb{R}^3} [(\nabla\psi^*)\varphi - \psi^*(\nabla\varphi)]\cdot d\vec{S} + (\hat{H}_0\psi, \varphi),
\end{aligned}
\tag{5.112}
$$

adică $\hat{H}_0$ este liniar hermitic numai pe un subdomeniu $E_0(\hat{H}_0)$ al domeniului "iniţial" de definiţie $E(\hat{H}_0)$ şi anume, pe spaţiul Sobolev restricţionat de ordinul II $E_0(\hat{H}_0) = {}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, ale cărui elemente au proprietatea $\psi|_{\partial\mathbb{R}^3} = 0$, $\nabla\psi|_{\partial\mathbb{R}^3} = 0$ (pentru $(\forall)\,\psi \in {}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$) şi deci, relaţia (5.112) se reduce la relaţia de definiţie (5.111) a proprietăţii de hermiticitate a lui $\hat{H}_0$.

Cum ${}_0\mathfrak{L}_2^2$ este dens în $\mathfrak{L}^2$ rezultă că operatorul $\hat{H}_0$ este simetric, adjunctul său $\hat{H}_0^+$ există şi îl putem "explicita" din relaţia de definiţie (5.113) $(\hat{H}_0^+\psi, \varphi) = (\psi, \hat{H}_0\varphi)$, cu $\psi \in E(\hat{H}_0^+)$ şi $(\forall)\,\varphi \in E_0(\hat{H}_0) = {}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$. Obţinem

$$
(\hat{H}_0^+\psi, \varphi) = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\varphi \right] d^3x = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\oint_{\partial\mathbb{R}^3} \psi^*\nabla\varphi\cdot d\vec{S} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\int_{\mathbb{R}^3} \nabla\psi^*\cdot\nabla\varphi\, d^3x
$$

şi cum $\varphi \in {}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, integrala pe suprafaţa închisă de la infinit se

anulează, iar din a doua integrală din dreapta vedem că $\psi \in E(\hat{H}^+)$ trebuie să fie "deocamdată" din $\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$. După încă o integrare prin părţi obţinem relaţia

$$(\hat{H}_0^+\psi,\varphi)=\frac{\hbar^2}{2m_0}\oint_{\partial\mathbb{R}^3}\varphi\nabla\psi^*\cdot d\vec{S}+\int_{\mathbb{R}^3}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi\right]^*\varphi\, d^3x,$$

din care deducem din nou că integrala pe suprafaţa de la infinit se anulează, deoarece $\varphi \in {}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$ şi, în plus, că funcţiile ψ din $E(\hat{H}^+)$ trebuie să fie din spaţiul Sobolev de ordin II $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$.

Prin urmare,

$$\int_{\mathbb{R}^3}(\hat{H}_0^+\psi)^*\varphi\, d^3x=\int_{\mathbb{R}^3}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi\right]^*\varphi\, d^3x\ ,\ (\forall)\ \varphi\in{}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3),$$

adică

$$\hat{H}_0^+=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\ ,\ \text{pe}\ \mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3). \tag{5.114}$$

Deoarece ${}_0\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)\subset\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$ şi $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)\cap C^2(\mathbb{R}^3)\subset\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, rezultă că oricare din domeniile de definiţie $E(\hat{H}_0)$ sau $E_0(\hat{H}_0)$ le-am considera pentru operatorul $\hat{H}_0$, adjunctul său $\hat{H}_0^+$ considerat pe $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$ reprezintă o extensie maximală $\hat{H}_0^+\supseteq\hat{H}_0$ şi deci $\hat{H}_0$ nu este un operator autoadjunct.

Pentru a stabili caracterul esenţial autoadjunct al operatorului $\hat{H}_0$, să verificăm dacă $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$ este domeniu de hermiticitate pentru $\hat{H}_0$. Dat fiind că "formele" (5.114) şi (5.109') sunt aceleaşi, calculele se obţin direct din relaţia (5.112) efectuând substituţia $\hat{H}_0\to\hat{H}_0^+$ şi considerând

funcţiile ψ, φ din $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, în loc de $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3) \cap C^2(\mathbb{R}^3)$. Rezultă relaţia

$$(\hat{H}_0^+\psi, \varphi) = (\psi, \hat{H}_0^+\varphi) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \oint_{\partial\mathbb{R}^3} [\psi^*(\nabla\varphi) - (\nabla\psi^*)\varphi] \cdot d\vec{S},$$

în care, pentru anularea integralei de suprafaţă este suficient să impunem condiţia ca funcţiile ψ, φ să fie din $E_0(\hat{H}_0^+) = {}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, deoarece $\hat{H}_0^+$ fiind o extensie a lui $\hat{H}_0$, el ,nu mai este restricţionat să acţioneze pe $C^2(\mathbb{R}^3)$ din $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$.

Referitor la adjunctul operatorului $\hat{H}_0^+$ avem

$$\left(\hat{H}_0^{++}\psi, \varphi\right) = \left(\psi, \hat{H}_0^+\varphi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \Delta\varphi \, d^3x =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \oint_{\partial\mathbb{R}^3} \psi^* \nabla\varphi \cdot d\vec{S} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla\psi^* \cdot \nabla\varphi \, d^3x$$

adică,

$$\left(\hat{H}_0^{++}\psi, \varphi\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \oint_{\partial\mathbb{R}^3} \psi^* \nabla\varphi \, d\vec{S} + \int_{\mathbb{R}^3} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi\right]^* \varphi \, d^3x,$$

de unde rezultă că funcţiile $\psi \in E(\hat{H}_0^{++})$ trebuie să fie atât din $\mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$ cât şi din ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3)$, ceea ce înseamnă $E(\hat{H}_0^{++}) = E_0(\hat{H}_0^+)$ şi, din anularea integralei de suprafaţă,

(5.115) $$\hat{H}_0^{++} = \hat{H}_0^+ = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta \text{ pe } E(\hat{H}_0^{++}) = E_0(\hat{H}_0^+) = {}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3),$$

adică, în adevăr, operatorul $\hat{H}_0^+$, definit pe ${}_0\mathfrak{L}_1^2(\mathbb{R}^3) \cap \mathfrak{L}_2^2(\mathbb{R}^3)$, este un operator autoadjunct, iar operatorul hamiltonian, asociat particulei libere nerelativiste $\hat{H}_0$, este un operator esenţial autoadjunct.

BIBLIOTECA FACULTĂŢII DE FIZICĂ

Aplicând teorema 5.24 obţinem că închiderea hamiltonianului liber $\hat{H}_0$

$$\underline{\hat{H}} = \frac{1}{2m_0}\hat{p}\cdot\hat{p} \tag{5.116}$$

reprezentată în spaţiul de configuraţie prin relaţia

$$\underline{\hat{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta, \text{ cu } E(\underline{\hat{H}}_0) = {}_0\mathcal{L}_1^2(\mathbb{R}^3)\cap\mathcal{L}_2^2(\mathbb{R}^3), \tag{5.116'}$$

este un operator autoadjunct şi, în baza Principiului de Corespondenţă, putem trage concluzia că

"în cazul microparticulei libere şi nerelativiste, numai închiderea autoadjunctă $\underline{\hat{H}}_0$ are sens fizic şi reprezintă efectiv operatorul asociat energiei particulei în formalismul Mecanicii Cuantice".

In fine, trecând la analiza operatorului Hamilton-Schrödinger, observăm din relaţiile (5.116), (5.108) şi (5.95), că sub aspect formal, stabilirea caracterului autoadjunct al închiderii

$$\underline{\hat{H}}_s = \underline{\hat{H}}_0 + \hat{V} \tag{5.117}$$

a operatorului hamiltonian $\hat{H}_s$, pare o chestiune destul de simplă, deoarece dacă $\underline{\hat{H}}_0$ şi $\hat{V}$ sunt autoadjuncţi şi în plus $E(\underline{\hat{H}}_0)\cap E(\hat{V}) \neq \varnothing$, atunci închiderea $\underline{\hat{H}}_s$ va fi şi ea autoadjunctă pe domeniul de definiţie $E(\underline{\hat{H}}_s) = E(\underline{\hat{H}}_0)\cap E(\hat{V})$. In realitate, problema autoadjunctivităţii închiderii operatorului Hamilton-Schrödinger este destul de complicată şi rezolvarea ei depinde în mod crucial de forma concretă a funcţiei $V(\vec{x}):\mathbb{R}^3\to\mathbb{R}$ a energiei potenţiale. Deşi după cele prezentate la "investigarea" operatorului energiei potenţiale, o asemenea afirmaţie

poate să surprindă, să nu uităm că în demersul efectuat nu am făcut nici o referire la relaţiile de incluziune, intersecţie etc., în care se pot afla cele două domenii de definiţie ${}_0\mathcal{L}^2_1 \cap \mathcal{L}^2_2$ şi $E(\hat{V})$. Ceea ce se poate întâmpla într-o situaţie concretă, adică pentru o funcţie $V(\vec{x})$ dată, este următorul lucru: funcţia $V(\vec{x})$ poate să aibă singularităţi atât de tari, sau atât de multe, încât domeniul $E(\hat{V})$, şi odată cu el domeniul de intersecţie $E(\underline{\hat{H}}_0) \cap E(\hat{V})$, să fie atât de "înguste" încât să nu poată fi utilizate în aplicaţia respectivă. Mai mult decât atât, dacă "teoretizăm" problema şi considerăm de exemplu o energie potenţială de tip δ-*Dirac*, $V(\vec{x}) = V_0 \delta(\vec{x})$, observăm că domeniul de definiţie $E(\hat{V}) = \{\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \mid \|\delta(\vec{x})\psi(\vec{x})\| < \infty\}$ este chiar mulţimea vidă, deoarece integrala

$$\|\delta(\vec{x})\psi(\vec{x})\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \psi^*(\vec{x})\delta(\vec{x})\delta(\vec{x})\psi(\vec{x})\, d^3x$$

este "complet divergentă".

Oricum, cu toate aceste dificultăţi, trebuie să observăm, având în vedere relaţia (5.117), că de fapt, problema nu se pune asupra caracterului autoadjunct al închiderii $\underline{\hat{H}}_s$ (de moment ce operatorii $\underline{\hat{H}}_0$ şi $\hat{V}$ sunt autoadjuncţi), ci asupra determinării concrete (pentru un potenţial, sau pentru o clasă de potenţiale date) a domeniului de definiţie $E(\underline{\hat{H}}_s)$. Dat fiind că $E(\underline{\hat{H}}_0)$ este cunoscut, fiind în acelaşi timp, în mod evident, independent de forma potenţialului V, rezultă imediat că o soluţie particulară a problemei este reprezentată de acele clase de potenţiale pentru care $E(\hat{V}) \supset \mathcal{L}^2_2(\mathbb{R}^3)$ sau, practic banal, $E(\hat{V}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Acest ultim caz l-am analizat deja la punctul (ii) şi, după cum am

văzut, el corespunde câmpurilor conservative de potenţial măsurabil şi mărginit pe spaţiul $\mathbb{R}^3$. Pentru celălalt caz, $E(\hat{V}) \supset \mathfrak{L}^2_2(\mathbb{R}^3)$, există următorul rezultat stabilit de T. Kato [35] în 1951:

"Dacă funcţia energiei potenţiale $V(\vec{x}): \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ este local pătratic integrabilă şi mărginită la infinit $(\lim_{|\vec{x}|\to\infty} V(\vec{x}) < \infty)$ atunci $E(\hat{V}) \supset E(\underline{\hat{H}}_0)$, iar operatorul liniar $\underline{\hat{H}}_s = \underline{\hat{H}}_0 + \hat{V}$, definit pe $E(\underline{\hat{H}}_s) \equiv E(\underline{\hat{H}}_0)$, este închiderea autoadjunctă a operatorului Hamilton-Schrödinger $\hat{H}_s = \hat{H}_0 + \hat{V}$ definit pe $E(\hat{H}_0)$".

Ca un exemplu important, fundamental din punct de vedere fizic, de aplicabilitate a teoremei Kato, menţionăm clasa câmpurilor potenţiale coulombiene

$$V(\vec{x}) = \frac{\lambda}{|\vec{x}|} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}.$$

In adevăr, după cum se observă imediat (utilizând coordonate sferice),

$$\lim_{r\to\infty} V(r) = 0$$

şi

$$\int_{B(0;a)} V^2(\vec{x})\, d^3x = 4\pi \int_0^a V^2(r) r^2 dr = 4\pi\lambda^2 a < \infty \ , (\forall) a \in [0,\infty).$$

Condiţiile impuse potenţialului fiind satisfăcute, rezultă că operatorul Hamilton-Schrödinger

$$\hat{H}_s = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + \frac{\lambda}{|\vec{x}|},$$

pentru particula nerelativistă în interacţiune cu un câmp coulombian,

este esenţial autoadjunct, iar închiderea sa $\underline{\hat{H}}_s$ este autoadjunctă.

Deşi clasa de potenţiale considerate în teorema lui Kato este mai generală decât clasa potenţialelor mărginite peste tot în $\mathbb{R}^3$, la fel ca aceasta, ea are neajunsul principal de a nu cuprinde toate potenţialele de interes din fizica cuantică. In acest sens, recomandăm cititorului interesat de generalizarea rezultatelor prezentate, la cazul altor tipuri de potenţiale, să consulte lucrările [35], [36], [64], [68].

C. ECUAŢIA DE VECTORI SI VALORI PROPRII SI MASURA SPECTRALA A UNUI OPERATOR AUTOADJUNCT CU SPECTRU DISCRET

Atât în primul paragraf al acestui capitol, cât şi în alte câteva rânduri până acum, am menţionat că ecuaţia de evoluţie

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

a stărilor cuantice ale unui sistem conservativ, descris de hamiltonianul (clasic) $H(x^a,p_a)$, cu $a=\overline{1,f}$, se reduce prin intermediul substituţiei

$$\Psi(x^a,t) = \psi(x^a)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right),$$

la ecuaţia lui Schrödinger pentru stările staţionare

(5.118) $\qquad \hat{H}\psi = E\psi,$

care reprezintă în fapt, apelând la definiţia 4.15, ecuaţia de vectori şi valori proprii $\{\psi_E;E\}$ a operatorului Hamilton $\hat{H}(x^a,\hat{p}_a)$ asociat sistemului. Am văzut de asemenea, în cazul concret al hamiltonianului

(5.119) $$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2}{dx^2}\ , \quad x\in[0,a]\subset\mathbb{R},$$

corespunzător particulei scalare, nerelativiste, unidimensional încutiată în intervalul $[0,a]$, cum ecuaţia Schrödinger atemporală

(5.120) $$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Leftrightarrow \quad \hat{H}_0\psi(x) = E\psi(x)\ , \ x\in[0,a],$$

împreună cu condiţiile fizico-matematice impuse funcţiei de undă, discutate în capitolul IV şi având în acest caz forma particulară

(5.121) $$\psi(\mathbb{R}-(0,a))\equiv 0,$$

au condus la setul (numărabil al) funcţiilor de amplitudine (ortonormate),

(5.122) $$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)\ , \quad x\in[0,a]\ ;\ n=1,2,3,..$$

şi de valori permise ale energiei

(5.123) $$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0a^2}\cdot n^2\ , \quad n=1,2,3,...$$

în stările cuantice staţionare ale microparticulei. Cu alte cuvinte, din punctul de vedere al definiţiei 4.15, prin integrarea ecuaţiei (5.120), cu condiţia Dirichlet (5.121) la capetele $x=0, x=a$, am rezolvat de fapt problema de vectori şi valori proprii (5.118) pentru hamiltonianul (5.119), privit ca operator autoadjunct pe ${}_0\mathcal{L}^2_1([0,a])\cap \mathcal{L}^2_2([0,a])$, determinând setul complet, ortonormal, de funcţii şi valori proprii (5.122-123) $\{\psi_n, E_n\}_{n\in\mathbb{N}^*}$ ale acestuia pe intervalul $[0,a]$.

In acest subparagraf vom expune, într-un context matematic suficient de bine precizat, principalele rezultate (cunoscute) referitoare la proprietăţile funcţiilor şi valorilor proprii ale operatorilor autoadjuncţi cu spectru discret, care au permis introducerea uneia din cele mai importante noţiuni din Analiza Funcţională, anume noţiunea

de măsură spectrală a unui operator autoadjunct "privită" ca o aplicaţie proiectivă pe suma directă a subspaţiilor α- caracteristice, definită pe mulţimea tuturor subintervalelor axei reale şi asociate unic operatorului autoadjunct $\hat{A}$. Asupra importanţei ei în dezvoltarea formalismului matematic al Mecanicii Cuantice, vom reveni la sfârşitul subparagrafului. Deocamdată, să începem cu următoarele trei proprietăţi generale.

Teorema 5.25. Mulţimea tuturor vectorilor $\psi_{(\alpha)} \in E$ corespunzători aceleiaşi valori proprii $\alpha \in \mathbb{C}$ a operatorului liniar $\hat{A}$, în spaţiul Hilbert E, formează un subspaţiu liniar al lui E, invariant sub acţiunea lui $\hat{A}$, numit subspaţiul α- caracteristic al operatorului $\hat{A}$ şi notat prin $E_\alpha(\hat{A})$.

Demonstraţie. Fie $\hat{A}: E(\hat{A}) \subset E \to E$ un operator liniar care admite scalarul $\alpha \in \mathbb{C}$ ca valoare proprie şi, deci, ecuaţia

$$\hat{A}\psi = \alpha\psi \ , \ \psi \in E(\hat{A})$$

va admite cel puţin o soluţie $\psi_{(\alpha)}$ din $E(\hat{A})$. Este evident atunci, că mulţimea $E_\alpha(\hat{A})$ a tuturor vectorilor $\varphi_{(\alpha)}$ coliniari cu $\psi_{(\alpha)}$, $\varphi_{(\alpha)} = c\psi_{(\alpha)}$, $(\forall)\ c \in \mathbb{C}$, este un subspaţiu liniar unidimensional al lui $E(\hat{A}) \subset E$ şi, în plus, din relaţia

$$\hat{A}\varphi_{(\alpha)} = \hat{A}\left(c\psi_{(\alpha)}\right) = c\hat{A}\psi_{(\alpha)} = \alpha c\psi_{(\alpha)} = \alpha\varphi_{(\alpha)}$$

rezultă că $E_\alpha(\hat{A})$ este invariant sub acţiunea lui $\hat{A}$. Dacă valorii proprii α îi corespund mai mulţi vectori proprii $\psi_{(\alpha)1}, \psi_{(\alpha)2}, \ldots$, este de asemenea evident că toţi aceştia vor fi din $E(\hat{A})$ şi astfel mulţimea tuturor combinaţiilor liniare ale lor

$$E_\alpha(\hat{A}) = \{c_1\psi_{(\alpha)1} + c_2\psi_{(\alpha)2} + \ldots \mid (\forall)\ c_1, c_2, \ldots \in \mathbb{C}\},$$

va reprezenta un subspaţiu liniar al lui $E(\hat{A}) \subset E$. Mai trebuie să arătăm că $E_\alpha(\hat{A})$ este invariant sub acţiunea lui $\hat{A}$. Ca şi în cazul unidimensional, aceasta decurge imediat din liniaritatea operatorului $\hat{A}$

$$\hat{A}\left(c_1\psi_{(\alpha)1} + c_2\psi_{(\alpha)2} + \ldots\right) =$$

$$= \hat{A}\left(c_1\psi_{(\alpha)1}\right) + \hat{A}\left(c_2\psi_{(\alpha)2}\right) + \ldots =$$

$$= c_1\hat{A}\psi_{(\alpha)1} + c_2\hat{A}\psi_{(\alpha)2} + \ldots =$$

$$= \alpha\left[c_1\psi_{(\alpha)1} + c_2\psi_{(\alpha)2} + \ldots\right],\ (\forall)\ c_1, c_2, \ldots \in \mathbb{C},$$

adică $\hat{A}\left[E_\alpha(\hat{A})\right] = E_\alpha(\hat{A})$. (q.e.d.)

Teorema 5.26. Toate valorile proprii ale unui operator autoadjunct sunt reale.

Demonstraţie. Fie $\hat{A}: E(\hat{A}) \subset E \to E$ un operator autoadjunct (în spaţiul Hilbert E) şi α oricare din valorile sale proprii. Cum α este o valoare proprie a lui $\hat{A}$, rezultă că ecuaţia

$$\hat{A}\psi_{(\alpha)} = \alpha\psi_{(\alpha)}$$

admite cel puţin o soluţie nebanală $\psi_{(\alpha)} \in E_\alpha(\hat{A}) \subset E(\hat{A})$ şi, astfel, efectuând produsul scalar al acesteia cu vectorul $\left(\hat{A}\psi_{(\alpha)}\right)$, obţinem

$$\left(\psi_{(\alpha)}, \hat{A}\psi_{(\alpha)}\right) = \alpha\left(\psi_{(\alpha)}, \psi_{(\alpha)}\right) = \alpha\left\|\psi_{(\alpha)}\right\|^2,$$

de unde rezultă, având în vedere că $\hat{A} = \hat{A}^+$,

$$\alpha\left\|\psi_{(\alpha)}\right\|^2 = \left(\psi_{(\alpha)}, \hat{A}\psi_{(\alpha)}\right) = \left(\hat{A}^+\psi_{(\alpha)}, \psi_{(\alpha)}\right) = \left(\hat{A}\psi_{(\alpha)}, \psi_{(\alpha)}\right),$$

adică,

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\alpha\|\psi_{(\alpha)}\|^2 = (\alpha\psi_{(\alpha)}, \psi_{(\alpha)}) = \alpha^*\|\psi_{(\alpha)}\|^2$$

şi cum $\|\psi_{(\alpha)}\|^2 > 0$, căci $\psi_{(\alpha)} \neq 0$, rezultă $\alpha = \alpha^*$. (q.e.d.)

Teorema 5.27. Oricare două subspaţii caracteristice corespunzătoare la două valori proprii diferite ale operatorului autoadjunct $\hat{A}$ (în spaţiul Hilbert E) sunt reciproc ortogonale.

Demonstraţie. Fie $\alpha \neq \beta$ două din valorile proprii (reale) ale operatorului autoadjunct $\hat{A}: E(A) \subseteq E \to E$. Evident, subspaţiile caracteristice $E_\alpha(\hat{A}), E_\beta(\hat{A})$ vor fi reprezentate cel puţin de câte un element $\psi_{(\alpha)} \in E(\hat{A}), \psi_{(\beta)} \in E(\hat{A})$, ca soluţie nebanală a ecuaţiei

$$\hat{A}\psi_{(\alpha)} = \alpha\psi_{(\alpha)} \text{ respectiv } \hat{A}\psi_{(\beta)} = \beta\psi_{(\beta)}$$

şi astfel, efectuând produsul scalar al vectorilor $\psi_{(\beta)}$ şi $\hat{A}\psi_{(\alpha)}$ (de exemplu), obţinem

$$(\psi_{(\beta)}, \alpha\psi_{(\alpha)}) = (\psi_{(\beta)}, \hat{A}\psi_{(\alpha)}) = (\hat{A}^*\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) =$$

$$= (\hat{A}\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) = (\beta\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)})$$

adică

$$\alpha(\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) = \beta^*(\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) = \beta(\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) \leftrightarrow (\beta - \alpha)(\psi_{(\beta)}, \psi_{(\alpha)}) \equiv 0$$

şi cum $\beta - \alpha \neq 0, \psi_{(\beta)} \neq 0, \psi_{(\alpha)} \neq 0$, rezultă $E_\beta(\hat{A}) \perp E_\alpha(\hat{A})$, oricare ar fi valorile proprii $\alpha \neq \beta$ ale autoadjunctului $\hat{A}$. (q.e.d.)

Pentru Mecanica Cuantică, aceste trei teoreme, 5.25-27, prezintă o importanţă principială. Astfel, teorema 5.25, care este valabilă desigur şi pentru cazul când $\hat{A}$ este autoadjunct, afirmă în fapt valabilitatea principiului superpoziţiei stărilor cuantice corespunzătoare aceleiaşi valori observabile α a mărimii fizice A căreia i s-a asociat

operatorul (autoadjunct) $\hat{A}$. Cu alte cuvinte, combinaţia liniară a două (sau mai multe) stări proprii ale sistemului, în care observabila A are valoarea α, este tot o stare proprie a sistemului corespunzătoare aceleiaşi valori a observabilei. Să vedem foarte pe scurt ce s-ar întâmpla dacă nu ar fi aşa. Atunci, dacă de exemplu spaţiul α-caracteristic nu ar fi un subspaţiu liniar al lui $E(\hat{A})$, deşi fiecare din elementele sale $\psi_{(\alpha)1}, \psi_{(\alpha)2}, \ldots$ ar fi din $E(\hat{A})$ (adică sunt stări cuantice în care observabila A are valoarea α), ar rezulta "în cel mai fericit caz" că oricare din stările $c_1\psi_{(\alpha)1} + c_2\psi_{(\alpha)2} + \ldots$, cu cel puţin un $c_i \neq 0$, nu ar mai fi din $E(\hat{A})$, ceea ce ar însemna că în orice combinaţie liniară de stări proprii ale observabilei A nu am mai putea defini observabila A. Mai mult decât atât, dacă $E_\alpha(\hat{A})$ nu ar fi liniar, atunci ar însemna că orice superpoziţie de stări proprii $\psi_{(\alpha)}$ nu ar mai fi din E, adică nu ar fi deloc o stare cuantică, ar fi altceva! In acelaşi sens, dacă prin absurd $E_\alpha(\hat{A}) \subset E(\hat{A})$ (considerat spaţiu liniar) nu ar fi invariant la acţiunea lui $\hat{A}$, ar rezulta că orice stare preparată din stările proprii $\psi_{(\alpha)}$ ar fi sau nu o stare proprie corespunzătoare unei alte valori β a observabilei A, sau, ar fi pur şi simplu o cu totul altă stare cuantică, "nespecifică" mărimii fizice $\hat{A}$. Am ţinut să facem aceste observaţii, deoarece ele se află într-o foarte strânsă legătură cu dificultăţile întâmpinate în tentativele de formulare operatorial- neliniară a Mecanicii Cuantice. Revenind la celelalte două teoreme, putem remarca, în acord cu Principiul de Corespondenţă, că teorema 5.26 "asigură" caracterul real (fizic măsurabil) al valorilor permise α ale observabilei A, iar teorema 5.27 stabileşte clar că oricărei stări proprii $\psi_{(\alpha)}$ îi va corespunde o

singură valoare proprie α a operatorului autoadjunct $\hat{A}$, adică o singură valoare (α) a mărimii fizice A. Pentru cititorul "mai puţin iniţiat" (sau mai grăbit cu lectura) reamintim că reciproca acestei afirmaţii nu este totdeauna adevărată : în general, unei valori proprii α îi corespund mai mulţi vectori proprii $\psi_{(\alpha)}$ liniar independenţi, iar numărul lor, reprezentând evident dimensiunea subspaţiului α - caracteristic, exprimă din punct de vedere cuantic ordinul degenerării "nivelului" α, adică $g(\alpha) = dim E_{\alpha}(\hat{A})$.

In continuare, dată fiind complexitatea deosebit de ridicată a rezolvării în general a problemei de vectori şi valori proprii pentru un operator autoadjunct oarecare, temă ce constituie de fapt subiectul principal al Teoriei Spectrale a Operatorilor (şi care depăşeşte cu mult cadrul acestei lucrări), ne vom limita la cazul operatorilor autoadjuncţi complet continui (definiţiile 5.6 şi 4.5), pentru care vom enunţa (fără detalierea demonstraţiilor) cele mai importante teoreme referitoare la proprietăţile "globale" ale funcţiilor şi valorilor proprii ale acestora. De altfel, în ceea ce îl interesează în mod direct pe fizician, analiza acestei probleme în cazul operatorilor autoadjuncţi mărginiţi şi compacţi, este suficientă pentru a surprinde, aşa cum spunea Erwin Schrödinger, "cuantificarea ca o problemă de vectori şi valori proprii".

Fie deci $\hat{A}: E(\hat{A}) \to E$ un operator autoadjunct asociat observabilei A. Dat fiind că $\hat{A}$ este presupus complet continuu, apare următoarea condiţie asupra domeniului de definiţie $E(\hat{A})$

Propoziţia 5.2. Un operator autoadjunct $\hat{A}: E(\hat{A}) \to E$ este complet continuu decă este compact şi definit peste tot în spaţiul Hilbert E, deci $E(\hat{A}) \equiv E$.

Demonstraţie. Compacticitatea trebuie să o impunem. In ce

priveşte domeniul de definiţie, demonstraţia este deosebit de simplă dacă aplicăm rezultatele prezentate în paragrafele V.4 şi V.5. Astfel, $\hat{A}$ trebuind să fie continuu, rezultă din teorema 4.6 că este mărginit şi cum în baza teoremei 5.8 $\hat{A}$ este un operator închis, rezultă din corolarul 4.1 că $E(\hat{A})\equiv E$. (q.e.d.)

Ca în studiul oricărei ecuaţii, primul aspect care trebuie elucidat, referitor la problema de vectori şi valori proprii (4.24), pentru operatorul compact şi autoadjunct $\hat{A}:E\to E$, este existenţa (cel puţin a) unei soluţii $\{\psi;\alpha\}$ în $E\times\mathbb{R}$. In acest sens, avem nevoie de

Definiţia 5.13. Pentru operatorul autoadjunct $\hat{A}:E\to E$, numerele reale

$$\alpha_{(m)}=\inf_{\|\psi\|=1}(\psi,\hat{A}\psi)\quad;\quad \alpha_{(M)}=\sup_{\|\psi\|=1}(\psi,\hat{A}\psi)$$

se numesc respectiv marginea inferioară şi marginea superioară a spectrului lui $\hat{A}$, iar intervalul real $\Delta(\hat{A})=[\alpha_{(m)},\alpha_{(M)}]$ poartă denumirea de domeniu spectral al operatorului (autoadjunct) $\hat{A}$.

Din definiţia 5.13 este evident că

$$\alpha_{(m)}\le(\psi,\hat{A}\psi)\le\alpha_{(M)},\ (\forall)\ \psi\in E \text{ cu } \|\psi\|=1,$$

iar pe de altă parte avem (utilizând "Cauchy-Schwarz-Buniacovski")

$$|(\psi,\hat{A}\psi)|\le\|\hat{A}\psi\|\cdot\|\psi\|=\|\hat{A}\psi\|$$

adică (definiţia 4.2)

$$\sup_{\|\psi\|=1}|(\psi,\hat{A}\psi)|=\|\hat{A}\|.$$

Rezultă atunci, că norma lui $\hat{A}$ este dată în raport cu $|\alpha_{(m)}|$ sau $|\alpha_{(M)}|$ prin relaţia

$$\|\hat{A}\|=\max\{|\alpha_{(m)}|,|\alpha_{(M)}|\}. \tag{5.124}$$

Pentru teorema care urmează, şi care asigură existenţa soluţiei problemei de vectori şi valori proprii pentru operatorul compact şi autoadjunct $\hat{A}:E\to E$, această relaţie, (5.124), este esenţială, deoarece, dacă $\alpha_{(M)}<|\alpha_{(m)}|$ atunci $-\|\hat{A}\|$ va coincide cu marginea inferioară $\alpha_{(m)}$ a spectrului lui $\hat{A}$, iar dacă $\alpha_{(M)}>|\alpha_{(m)}|$ atunci, evident, $\|\hat{A}\|$ va reprezenta marginea superioară a spectrului lui $\hat{A}$. Cu alte cuvinte, oricare ar fi $\alpha_{(m)}<\alpha_{(M)}$ din $\mathbb{R}$, $-\|\hat{A}\|$ sau $\|\hat{A}\|$ identifică "unul din capetele" domeniului spectral al operatorului (autoadjunct) $\hat{A}$.

Teorema 5.28. Orice operator (nenul) autoadjunct şi compact $\hat{A}:E\to E$ admite cel puţin o valoare proprie (nenulă) α_0 şi o funcţie proprie $\psi_{(\alpha_0)}$.

Demonstraţie. Fie de exemplu $\alpha_{(M)}>|\alpha_{(m)}|$. Atunci $\|\hat{A}\|=\alpha_{(M)}$ şi vom considera în E şirul mărginit $\{\varphi_n \mid \|\varphi_n\|=1\}_{n\in N}$ pentru care

$$\|\hat{A}\|=\lim_{n\to\infty}(\varphi_n,\hat{A}\varphi_n).$$

Rezultă

$$\|\hat{A}\varphi_n-\|\hat{A}\|\varphi_n\|^2=(\hat{A}\varphi_n-\|\hat{A}\|\varphi_n,\hat{A}\varphi_n-\|\hat{A}\|\varphi_n)=\|\hat{A}\varphi_n\|^2-2\|\hat{A}\|(\varphi_n,\hat{A}\varphi_n)+\|\hat{A}\|^2\le$$
$$\le 2\|\hat{A}\|^2-2\|\hat{A}\|(\varphi_n,\hat{A}\varphi_n)$$

şi deci

$$\lim_{n\to\infty}\|\hat{A}\varphi_n-\|\hat{A}\|\varphi_n\|=0.$$

Cum $\{\varphi_n\}$ este mărginit, el va conţine un subşir $\{\psi_k \mid \|\psi_k\|=1\}_{k\in N}$ slab convergent la elementul $\psi\in E$ şi, în acelaşi timp, $\hat{A}$ fiind un operator

compact, şirul $\{\hat{A}\psi_k\}$ va converge tare la $\hat{A}\psi \in E$. In acest fel avem

$$0 = \lim_{k\to\infty} \|\hat{A}\psi_k - \|\hat{A}\|\psi_k\| = \lim_{k\to\infty} \|\hat{A}\psi - \|\hat{A}\|\psi_k\|$$

adică şirul $\{\|\hat{A}\|\psi_k\}_{k\in N}$ converge tare la elementul $\hat{A}\psi$ din E, ceea ce atrage automat şi convergenţa slabă şi, cum $\{\psi_k\}_{k\in N}$ converge deja în sens slab la ψ, iar limita unui şir slab convergent este unică, rezultă în final

$$\hat{A}\psi_{(\alpha_0)} = \alpha_0\psi_{(\alpha_0)}, \text{ cu } \alpha_0 = \|\hat{A}\| \text{ şi } \psi_{(\alpha_0)} = \psi.$$

Deoarece $\hat{A}\psi = \|\hat{A}\|\psi$, rezultă

$$\lim_{k\to\infty} \|\psi - \psi_k\| = 0,,$$

adică şirul $\{\psi_k\}_{k\in N}$ converge la ψ şi în sens tare şi cum $\|\psi_k\| = 1$, rezultă că funcţia proprie $\psi_{(\alpha_0)} = \psi$ este diferită de zero. In cazul $\alpha_{(M)} < |\alpha_{(m)}|$, deci $-\|\hat{A}\| = \alpha_{(m)}$, demonstraţia urmează o cale cu totul similară. (q.e.d.)

Tot din definiţia 5.13, având în vedere şi faptul că teorema 5.28 este o teoremă de "existenţă minimală", rezultă şi

Propoziţia 5.3. Toate valorile proprii α ale operatorului autoadjunct $\hat{A}$ pe spaţiul Hilbert E sunt din domeniul spectral $\Delta(\hat{A})$ al operatorului $\hat{A}$.

Demonstraţia este evidentă, deoarece relaţia

$$\alpha_{(m)} \le |\varphi, \hat{A}\varphi| \le \alpha_{(M)}$$

fiind valabilă oricare ar fi $\varphi \in E$, ea va rămâne valabilă pentru orice set de funcţii proprii $\psi_{(\alpha)}$ din oricare din subspaţiile α- caracteristice ale

lui $\hat{A}$ şi deci, oricare din valorile proprii $\alpha \in \mathbb{R}$ verifică relaţia

$$\alpha_{(m)} \le \left(\psi_{(\alpha)}, \hat{A}\psi_{(\alpha)}\right) = \alpha \left\|\psi_{(\alpha)}\right\|^2 = \alpha \le \alpha_{(M)}$$

pentru orice $\psi_{(\alpha)} \in E_\alpha(\hat{A})$, cu $\left\|\psi_{(\alpha)}\right\| = 1$, adică $\{\alpha\} \subset \Delta(\hat{A})$. (q.e.d.)

In ce priveşte ordinul $g(\alpha) = dim E_\alpha(\hat{A})$ al degenerării nivelului α avem

Teorema 5.29. Orice subspaţiu α- caracteristic operatorului compact şi autoadjunct $\hat{A}: E \to E$ este de dimensiune finită.

Demonstraţie. Va trebui să arătăm că oricărei valori proprii $\alpha \in \{\alpha\} \subset \Delta(\hat{A})$ îi corespunde un număr finit de vectori proprii liniar independenţi $\{\psi_{(\alpha)i}\}$, cu $E_\alpha(\hat{A}) = span\{\psi_{(\alpha)i}\}_{i=\overline{1,g(\alpha)<\infty}}$. Pentru aceasta vom aplica metoda reducerii la absurd. Fie deci α valoarea proprie a lui $\hat{A}$ pentru care există o infinitate de vectori proprii liniar independenţi $\psi_{(\alpha)i}$ care generează $E_\alpha(\hat{A})$. Prin procedeu Gramm-Schmidt construim din $\{\psi_{(\alpha)i}\}_{i=\overline{1,\infty}}$ baza ortonormală $B_0\left[E_\alpha(\hat{A})\right] = \{\varphi_{(\alpha)i}\}_{i=\overline{1,\infty}}$ de vectori proprii al lui $\hat{A}$ în $E_\alpha(\hat{A})$. Din $B_0\left[E_\alpha(\hat{A})\right]$ putem extrage un subşir $\{\chi_{(\alpha)k}\}_{k=\overline{1,\infty}}$ slab convergent la un element $\chi \in E_\alpha(\hat{A})$. Dat fiind că $\hat{A}$ este compact, rezultă că şirul $\{\hat{A}\chi_{(\alpha)k}\}_{k=\overline{1,\infty}}$ converge tare la $\hat{A}\chi$ şi, în acelaşi timp, pentru oricare două elemente $\chi_{(\alpha)k}, \chi_{(\alpha)l}$ ale şirului $\{\chi_{(\alpha)n}\}_{n=\overline{1,\infty}}$, este valabilă inegalitatea $\left\|\hat{A}\left(\chi_{(\alpha)k} - \chi_{(\alpha)l}\right)\right\| = \sqrt{2}|\alpha| > 0, (\forall)\ k,l \in \mathbb{N}$ care de fapt, după cum se poate observa uşor, violează convergenţa şirului

$\{\hat{A}\chi_{(\alpha)n}\}_{n=\overline{1,\infty}}$ la elementul $\hat{A}\chi \in E_\alpha(\hat{A})$. Din această contradicţie rezultă că nu există nici o valoare proprie α a operatorului compact autoadjunct $\hat{A}: E \to E$ pentru care $E_\alpha(\hat{A})$ să fie generat de o infinitate de vectori proprii liniar independenţi $\{\psi_{(\alpha)i}\}$ şi deci $g(\alpha) = dim E_\alpha(\hat{A}) < \infty$, oricare ar fi valoarea proprie α din $\Delta(\hat{A})$. (q.e.d.)

Aproape de fiecare dată până acum ne-am referit la mulţimea valorilor proprii ale unui operator autoadjunct şi compact $\hat{A}$, notată simbolic cu $\{\alpha\}$, fără a fi formulat în mod riguros un rezultat care să asigure pluralitatea acestuia şi care, mai ales, să-i stabilească structura. In acest sens, urmând îndeaproape datorită claritătii expunerii, linia de prezentare a rezultatelor propusă de C. Kalik în lucrarea [33], avem ca esenţială în "modelarea cuantificării".

Teorema 5.30. Un operator autoadjunct şi complet continuu $\hat{A}: E \to E$ admite cel mult un şir infinit de valori proprii $\Sigma(\hat{A}) = \{\alpha_n\}_{n \in \mathbb{N}}$, cu cel mult un punct de acumulare, care este 0.

Demonstraţie. Pentru a nu încărca notaţiile, vom desemna ψ_n (în loc de $\psi_{(\alpha_n)}$) ca o funcţie proprie a lui $\hat{A}$, aparţinând subspaţiului α_n-caracteristic $E_n(\hat{A})$. Trebuie să arătăm că, pentru $(\forall)\varepsilon > 0$, mulţimea

$$\Sigma_\varepsilon(\hat{A}) = \{\alpha \in \mathbb{R} \mid |\alpha| > \varepsilon\}$$

este de cardinal finit. Similar metodei utilizate în demonstrarea teoremei 5.29, presupunem că există un $\varepsilon > 0$ pentru care $\Sigma_\varepsilon(\hat{A}) = \{\alpha_i \mid |\alpha_i| > \varepsilon\}_{i=\overline{1,\infty}}$ (conţine un număr infinit de valori proprii ale lui $\hat{A}$). Cum $\{\|\psi_i\| = 1\}_{i=\overline{1,\infty}}$, şirul de funcţii proprii $\{\psi_i \mid \psi_i \in E_i(\hat{A})\}_{i=\overline{1,\infty}}$,

corespunzătoare valorilor proprii α_i din $\Sigma_\varepsilon(\hat{A})$, va conţine un subşir $\{\chi_i \mid \chi_i \in E_i(\hat{A})\}_{i=\overline{1,\infty}}$ slab convergent la elementul $\chi \in E$ şi fiindcă $\hat{A}$ este compact, şirul $\{\hat{A}\chi_i \mid \chi_i \in E_i(\hat{A})\}_{i=\overline{1,\infty}}$ va converge tare la $\hat{A}\chi \in E$. Dar, oricare ar fi χ_k, χ_l cu $k \neq l$, din subşirul slab convergent, avem

$$\|\hat{A}(\chi_k - \chi_l)\|^2 = \|\hat{A}\chi_k\|^2 - (\hat{A}\chi_k, \hat{A}\chi_l) - (\hat{A}\chi_l, \hat{A}\chi_k) + \|\hat{A}\chi_l\|^2 =$$
$$= \alpha_k^2 + \alpha_l^2 - \alpha_k\alpha_l[(\chi_k, \chi_l) + (\chi_l, \chi_k)]$$

şi cum, în baza teoremei 5.27, $E_k(\hat{A}) \perp E_l(\hat{A})$, obţinem

$$\|\hat{A}(\chi_k - \chi_l)\| = \sqrt{\alpha_k^2 + \alpha_l^2} > \sqrt{2}\varepsilon \ , \ (\forall)\ k, l \in \mathbb{N},$$

ceea ce contrazice convergenţa şirului $\{\hat{A}\chi_i \mid \chi_i \in E_i(\hat{A}); \alpha_i \in \Sigma_\varepsilon(\hat{A})\}_{i=\overline{1,\infty}}$ la elementul $\hat{A}\chi$ din E. Prin urmare, $(\forall)\varepsilon > 0, \Sigma_\varepsilon(\hat{A})$ conţine doar un număr <u>finit</u> de valori proprii şi evident, pentru $\varepsilon \to 0$, $|\alpha_{min}| \to 0$, adică acestea se pot acumula cel mult în punctul zero. (q.e.d.)

Definiţia 5.14. Mulţimea $\Sigma(\hat{A}) = \{\alpha_n\}_{n\in N} \subset \Delta(\hat{A})$ a tuturor valorilor proprii ale lui $\hat{A}$ (compact şi autoadjunct) se numeşte <u>spectrul</u> operatorului $\hat{A}$.

Din teorema 5.30 şi definiţia 5.14 este mai mult decât evidentă

Propoziţia 5.4. Spectrul unui operator autoadjunct şi complet continuu <u>este discret</u>.

In continuare, presupunând $\Sigma(\hat{A})$ (discret) de cardinal infinit, considerăm în subspaţiul α_n- caracteristic, $E_n(\hat{A})$, baza ortonormală $B_0[E_n(\hat{A})] = \{\chi_{n\mu} \mid \mu = \overline{1, g(n)}\}$ şi introducem operatorul $\hat{\Pi}_n : E \to E_n(\hat{A})$ prin relaţia

(5.125) $$\hat{\Pi}_n\psi=\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}\ ,\ (\forall)\ \psi\in E.$$

Teorema 5.31. Operatorul liniar $\hat{\Pi}_n$ este autoadjunct şi idempotent

$$\hat{\Pi}_n^+=\hat{\Pi}_n\ ,\ \left(\hat{\Pi}_n\right)^2=\hat{\Pi}_n,$$

adică este operatorul de proiecţie (sau proiectorul) pe subspaţiul α_n-caracteristic.

Demonstraţie. Dat fiindcă $E\left(\hat{\Pi}_n\right)=E$ şi $\hat{\Pi}_n$ este liniar, în baza teoremei Hellinger-Toeplitz 5.7, este suficient să arătăm că $\hat{\Pi}_n$ este hermitic, pentru a fi "automat" autoadjunct (şi mărginit). In adevăr,

$$\left(\hat{\Pi}_n\psi,\varphi\right)=\left(\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu},\varphi\right)=\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\psi,\chi_{n\mu})(\chi_{n\mu},\varphi)=$$

$$=\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\varphi)(\psi,\chi_{n\mu})=\left(\psi,\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\varphi)\chi_{n\mu}\right)=\left(\psi,\hat{\Pi}_n\varphi\right),$$

oricare ar fi ψ,φ din $E\left(\hat{\Pi}_n\right)=E$. A doua proprietate, cea de idempotenţă, rezultă în felul următor

$$\left(\hat{\Pi}_n\right)^2\psi=\hat{\Pi}_n\left(\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}\right)=\sum_{\nu=1}^{g(n)}\left(\chi_{n\nu},\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}\right)\chi_{n\nu}=$$

$$=\sum_{\nu=1}^{g(n)}\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)(\chi_{n\nu},\chi_{n\mu})\chi_{n\nu}=\sum_{\nu=1}^{g(n)}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\delta_{\nu\mu}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\nu}=$$

$$=\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}=\hat{\Pi}_n\psi\ ,\ (\forall)\ \psi\in E\left(\hat{\Pi}_n\right)=E,$$

adică $\hat{\Pi}_n^2=\hat{\Pi}_n$. (q.e.d.)

Cu ajutorul familiei de proiectori $\left\{\hat{\Pi}_n\right\}_{n\in\mathbb{N}}$ (daţi de (5.125) şi

teorema 5.31) pe familia $\{E_n(\hat{A})\}_{n\in\mathbb{N}}$ a subspaţiilor α- caracteristice şi a următoarei teoreme, 5.32, demonstrată în extenso în [33], vom putea obţine formula de reprezentare spectrală a operatorului autoadjunct $\hat{A}$ cu spectrul $\Sigma(\hat{A})$ discret şi vom putea defini măsura spectrală a acestuia.

Teorema 5.32. Fie $\hat{A}:E\to E$ un operator autoadjunct şi compact. Înţelegând prin $\{\chi_{n\mu}\}$, cu $n=\overline{1,N}=card\,\Sigma(\hat{A})$ şi $\mu=\overline{1,g(n)}=dim\,E_n(\hat{A})$, mulţimea tuturor vectorilor bazelor ortonormale în subspaţiile α-caracteristice din familia $\{E_n\}_{n=\overline{1,N}}$, atunci, pentru orice $\psi\in E$, este valabilă relaţia

$$\hat{A}\psi=\sum_{n=1}^{N}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\left(\chi_{n\mu},\hat{A}\psi\right)\chi_{n\mu} \tag{5.126}$$

şi nici o valoare proprie α a operatorului $\hat{A}$ nu se găseşte în afara spectrului $\Sigma(\hat{A})=\{\alpha_n\}_{n=\overline{1,N}}\subset\Delta(\hat{A})$ al acestuia.

Atât din motive de generalitate, cât şi pentru majoritatea cazurilor de interes din Mecanica Cuantică, vom lua $card\,\Sigma(\hat{A})=N=\infty$ şi observăm, din formula (5.126), că în această situaţie teorema 5.32 afirmă că şirul infinit de vectori proprii ortonormali $\{\chi_{n\mu}\mid\mu=\overline{1,g(n)},\ n=\overline{1,\infty}\}$ ai operatorului $\hat{A}$ formează o bază (ortonormală) în spaţiul Hilbert (separabil)

$$E(\hat{A})=\bigoplus_{n=1}^{\infty}E_n(\hat{A})=E_{\alpha_1}\oplus E_{\alpha_2}(\hat{A})\oplus\ldots\oplus E_{\alpha_n}(\hat{A})\oplus\ldots, \tag{5.127}$$

care (pentru $\hat{A}$ autoadjunct complet continuu şi $N=\infty$) coincide cu întregul spaţiul Hilbert E. Acest aspect este deosebit de important

pentru înţelegerea cuantificării unei observabile A ca rezolvare a problemei de vectori şi valori proprii pentru operatorul autoadjunct $\hat{A}$ asociat acesteia, deoarece concluzia care se desprinde este aceea că problema este general rezolvată deîndată ce cunoaştem mulţimea tuturor subspaţiilor α- caracteristice $\{E_n(\hat{A})\}_{n=\overline{1,\infty}}$ şi întreaga familie $\{\hat{\Pi}_n\}_{n=\overline{1,\infty}}$ a proiectorilor pe acestea. Intr-o manieră sintetizantă, cu totul semnificativă, toate aceste informaţii sunt codificate în formula spectrală a operatorului $\hat{A}$. Intr-adevăr, având în vedere caracterul autoadjunct al lui $\hat{A}$, putem scrie relaţia (5.126) pentru $N=\infty$ sub forma

$$\hat{A}\psi = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\hat{A}\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu} = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\alpha_n(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu} =$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\left[\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}\right] = \sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\hat{\Pi}_n\psi \ , \ (\forall)\ \psi\in E(\hat{A})\subseteq E,$$

care ne conduce direct la formula de reprezentare spectrală a oricărui operator autoadjunct $\hat{A}$ cu spectrul $\Sigma(\hat{A})$ discret şi de cardinal infinit

$$\hat{A}=\sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n\hat{\Pi}_n, \ (\text{cu } \{\alpha_n\}_{n=\overline{1,\infty}}=\Sigma(\hat{A})). \tag{5.128}$$

In fine, dacă ne referim la operatorul $\hat{\Pi}=\sum_{n=1}^{\infty}\hat{\Pi}_n$ remarcăm imediat că acesta este un proiector (deoarece $\hat{\Pi}_n^{+}=\hat{\Pi}_n$, $\hat{\Pi}_n^2=\hat{\Pi}_n$, $\hat{\Pi}_n\hat{\Pi}_m=\hat{\Pi}_m\hat{\Pi}_n\equiv 0$,$(\forall)\ n,m\in\mathbb{N}$) şi mai mult decât atât, că este egal cu operatorul unitate $\hat{1}$ deoarece

$$\hat{\Pi}\psi=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}, \ (\forall)\ \psi\in\overset{\infty}{\underset{n=1}{\oplus}}E_n(\hat{A}),$$

iar $\{\chi_{n\mu} \mid \mu=\overline{1,g(n)}\ ,\ n=\overline{1,\infty}\}$ este o bază ortonormală în (5.127) şi deci, conform relaţiei (2.38) din teorema lui Parseval 2.28,

$$\psi=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}(\chi_{n\mu},\psi)\chi_{n\mu}=\hat{\Pi}\psi\,.$$

Notând în general cu $\hat{\Pi}_{(\alpha)}$ proiectorul pe subspaţiul α- caracteristic $E_\alpha(\hat{A})\subset E(\hat{A})$, formula de definiţie a operatorului $\hat{\Pi}=\hat{1}$ se transcrie sub forma "mai liberă"

(5.129) $$\hat{1}=\sum_{\alpha}\hat{\Pi}_{(\alpha)},\ \text{pentru}\ (\forall)\ \alpha\in\Sigma(\hat{A})$$

şi ajungem astfel la relaţia de definiţie

(5.130) $$\hat{\Pi}[\Gamma]=\sum_{\alpha\in\Gamma}\hat{\Pi}_{(\alpha)},\ \text{cu}\ \Gamma\subseteq\Delta(\hat{A})\subseteq\mathbb{R},$$

a măsurii spectrale a operatorului autoadjunct $\hat{A}:E(\hat{A})\to E$, care aşa cum spuneam la începutul subparagrafului, se observă că este o aplicaţie proiectivă pe suma directă $\oplus_{\alpha\in\Gamma}E_\alpha(\hat{A})$ a subspaţiilor α- caracteristice (cu $\alpha\in\Gamma\subseteq\Delta(\hat{A})$), fiind definită pe mulţimea tuturor subintervalelor Γ din $\Delta(\hat{A})\subseteq\mathbb{R}$ şi asociată unic operatorului $\hat{A}$ care, la rândul său, se reprezintă spectral (într-o scriere formală) prin

(5.131) $$\hat{A}=\sum_{\alpha}\alpha\hat{\Pi}_{(\alpha)},\ \text{pentru}\ (\forall)\ \alpha\in\Sigma(\hat{A})\subseteq\Delta(\hat{A})\subseteq\mathbb{R}.$$

Inspectând ultimele două formule, constatăm că ele sunt practic independente de natura spectrului (discret, continuu sau mixt) al operatorului autoadjunct $\hat{A}$ (ceea ce dealtfel se şi demonstrează în Teoria Spectrală a Operatorilor) şi că într-adevăr problema cuantificării oricărei observabile A este rezolvată complet prin determinarea concretă a măsurii spectrale a operatorului autoadjunct asociat acesteia.

V.6. Comutatori

In acest paragraf vom prezenta noţiunea de grup continuu, sau grup Lie, care ne va permite o introducere naturală a comutatorului, ca operaţie internă pe spaţiul liniar subîntins de generatorii algebrei Lie asociată acestuia.

A. ELEMENTE DE TEORIA GRUPURILOR

Definiţia 6.1. Un grup G este un set de elemente $\{a,b,...\}$ cu o lege de compoziţie (multiplicare) $(a,b):G\times G\to G$ şi se notează pe scurt cu $(a,b)=ab$, ce satisface următoarele proprietăţi:

(i) Închidere. Dacă $a\in G$ şi $b\in G$, atunci şi $ab\in G$;

(ii) Asociativitate. Dacă $a\in G, b\in G, c\in G$, atunci $(ab)c=a(bc)$;

(iii) Element unitate. Există un element $e\in G$, numit element unitate stâng, astfel încât $ea=a$ pentru orice $a\in G$;

(iv) Element invers. Pentru orice $a\in G$, există un element $a^{-1}\in G$, numit element invers stâng, astfel încât $a^{-1}a=e$.

Propoziţia 6.1. Elementul invers stâng este şi element invers drept, adică

$$a_s^{-1}a=e_s \Rightarrow aa_s^{-1}=e_s.$$

Demonstraţie. Pe baza axiomei (iv) să considerăm relaţiile

$$a_s^{-1}a=e_s\ ;\ \left(a_s^{-1}\right)^{-1}a_s^{-1}=e_s.$$

Axioma (ii) ne permite să scriem, pe de o parte

$$\left[\left(a_s^{-1}\right)^{-1}a_s^{-1}\right]\left(aa_s^{-1}\right)=\left(a_s^{-1}\right)^{-1}\left(a_s^{-1}a\right)a_s^{-1}=$$

$$=\left(a_s^{-1}\right)^{-1}e_sa_s^{-1}=\left(a_s^{-1}\right)^{-1}a_s^{-1}=e_s,$$

iar pe de altă parte

$$\left[\left(a_s^{-1}\right)^{-1}a_s^{-1}\right]\left(aa_s^{-1}\right)=e_s\left(aa_s^{-1}\right)=aa_s^{-1}.$$

Prin identificare rezultă $aa_s^{-1}=e_s$. (q.e.d.)

Datorită acestei teoreme vom omite indicele s la elementul invers, deci vom scrie a^{-1} pentru elementul invers al lui a.

Propoziţia 6.2. Elementul unitate stâng este şi element unitate drept, adică

$$e_sa=a \Rightarrow ae_s=a.$$

Demonstraţie. Avem, pe de o parte

$$(aa^{-1})a=e_sa=a,$$

iar pe de altă parte

$$(aa^{-1})a=a(a^{-1}a)=ae_s,$$

deci $a=ae_s$. (q.e.d.)

De acum înainte vom pune $e_s=e$.

Propoziţia 6.3. Pentru orice $a\in G$ elementul invers a^{-1} este unic.

Demonstraţia o vom face prin reducere la absurd. Presupunem că

$$a'^{-1}a=e \text{ şi } a''^{-1}a=e.$$

Atunci, avem pe de o parte

$$a'^{-1}(aa''^{-1})=a'^{-1}e=a'^{-1},$$

iar pe de altă parte

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$a'^{-1}(aa''^{-1}) = (a'^{-1}a)a''^{-1} = ea''^{-1} = a''^{-1},$$

deci $a'^{-1} = a''^{-1}$. (q.e.d.)

Propoziţia 6.4. Intr-un grup G există un singur element neutru e.

Demonstraţie. Fie e şi e' elemente neutre. Avem evident

$e' = ee' = e$. (q.e.d.)

Dacă legea de multiplicare este comutativă, adică $ab = ba$ oricare ar fi a şi b din G, atunci G este grup abelian.

Ordinul grupului G este numărul n de elemente din G. Pentru grupuri finite, n este un număr întreg pozitiv.

Un subgrup este un subset de elemente din G care formează, de asemenea, grup.

Un număr de elemente din G sunt independente dacă ele nu pot fi exprimate în funcţie de celelalte. Dacă orice element al grupului G poate fi exprimat funcţie de o mulţime de elemente independente, atunci acestea reprezintă generatorii grupului.

Dimensiunea unui grup este egală cu numărul generatorilor săi.

Date două grupuri $A = \{a_1, a_2, ...\}$ şi $B = \{b_1, b_2, ...\}$, dacă elementele a_i comută cu elementele b_j, atunci se poate defini produsul direct $A \otimes B = \{a_i b_j\}$ cu legea de compoziţie

(6.1) $a_i b_j \cdot a_k b_s = a_i a_k \cdot b_j b_s$.

In practică, este util să exprimăm un grup G ca produsul direct al unor grupuri de dimensiune mai mică. Acest lucru este posibil dacă grupul G conţine subgrupuri invariante. Subgrupul N al lui G este subgrup

invariant dacă, pentru orice element $t \in N$, ata^{-1} este un element al lui N, pentru toate elementele a din G. In aceste condiţii, G se poate scrie ca un produs direct de subgrupuri invariante. Un grup G ce nu conţine nici un subgrup invariant, cu excepţia lui G şi a elementului unitate, se numeşte grup simplu. Un grup care are subgrupuri invariante proprii, dar nu are nici un subgrup invariant abelian, se numeşte grup semisimplu.

Mulţimea elementelor unui grup G, care comută cu orice element al grupului, formează un subgrup invariant al lui G, numit centrul grupului şi notat cu Z. Orice subgrup W al lui Z este un subgrup invariant abelian al lui G.

Intre două grupuri A şi B putem avea două categorii de aplicaţii:

(i) Aplicaţia izomorfă, este o bijecţie cu proprietatea

(6.2) Dacă $a_i \to b_i$ şi $a_j \to b_j$, atunci $a_i a_j \to b_i b_j$;

(ii) Aplicaţia homeomorfă, este o surjecţie care satisface (6.2).

Dacă aplicaţiile (i) şi (ii) se definesc în interiorul aceluiaşi grup G, atunci avem:

(i') Automorfism, atunci când grupul G este aplicat izomorf în el însuşi;

(ii') Endomorfism, atunci când grupul G se aplică homeomorf pe unul din subgrupurilor sale.

Prezentăm în continuare, fără demonstraţie, două teoreme referitoare la aplicaţiile în interiorul unui grup.

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 6.1. Toate automorfismele unui grup G formează grupul automorfismelor lui G, notat cu $AutG$.

Mulţimea elementelor lui G, care se aplică prin homeomorfismul $f: G \to H$, pe elementul unuitate al lui H, se numeşte nucleul homeomorfismului şi se notează cu $Kerf$.

Teorema 6.2. Nucleul homeomorfismului $f: G \to H$ este un subgrup invariant al lui G.

Definiţia 6.2. O reprezentare este o corespondenţă dintre elementele $\{a_i\}$ ale unui grup abstract G şi un set de matrici $D(a_i)$ astfel încât

(i) dacă $a_1 a_2 = a$ atunci $D(a_1)D(a_2) = D(a)$;

(ii) $D(e) = I$, unde I este matricea unitate.

Din (i) şi (ii) rezultă că

$$D(a^{-1}) = [D(a)]^{-1}.$$

Practic, diverse grupuri abstracte vor fi introduse prin intermediul reprezentărilor lor matriciale. Se pot considera matricile $D(a)$ ca transformări liniare ale unui set de variabile $\{\varphi^i\}$, într-un spaţiu vectorial L. Dimensiunea unei reprezentări este egală cu dimensiunea spaţiului vectorial în care acţionează. Astfel, dacă L este n-dimensional, atunci matricile reprezentării vor fi nxn.

Două reprezentări D_1 şi D_2 ale aceluiaşi grup G sunt echivalente, dacă există o matrice nesingulară S astfel ca să existe egalitatea

(6.3) $D_1(a) = SD_2(a)S^{-1}$, $(\forall)\ a \in G$.

Dacă o reprezentare $D(a)$ poate fi pusă, printr-o transformare

echivalentă (6.3), în forma bloc diagonală

$$(6.4)\qquad \begin{pmatrix} D_1(a) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2(a) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & D_m(a) \end{pmatrix}, \ (\forall)\ a \in G,$$

atunci $D(a)$ se numeşte reprezentare reductibilă şi se scrie ca o sumă directă $D_1(a) \oplus D_2(a) \oplus \dots \oplus D_m(a)$. Dacă reprezentarea $D(a)$ nu poate fi adusă la forma (6.4), atunci ea este ireductibilă. In acest caz, toate stările sunt legate între ele prin grupul transformărilor, în timp ce reprezentările reductibile (6.4) lasă invariante m subspaţii proprii ale spaţiului vectorial L.

Pentru fiecare reprezentare $D(a)$ există o alta, definită de matricile $D^{-1}(a)$. Aceste două reprezentări se numesc contragradiente şi ele sunt echivalente, dacă există matricea nesingulară S astfel încât

$$(6.5)\qquad D^{-1}(a) = S\, D(a) S^{-1}\ , \ (\forall)\ a \in G.$$

Dacă reprezentarea este şi finit dimensională atunci, din (6.5), rezultă imediat că

$$(6.6)\qquad (\det D)^2 = 1.$$

Un interes aparte pentru Mecanica Cuantică îl formează reprezentările unitare. Grupul matricilor care lasă invariant produsul scalar (x,y) poartă numele de grup de matrici unitare şi se notează cu $U(n)$. Pentru $n>1$, grupul este neabelian. Elementele grupului sunt matrici $n \times n$ cu proprietatea

$$(6.7)\qquad U U^{+} = U^{+} U = I.$$

Dacă, în plus, matricile grupului au determinantul egal cu unu, grupul se numeşte special unitar şi se notează cu $SU(n)$. Grupurile $SU(2), SU(3)$

şi produsul direct $SU(2)\otimes U(1)$ sunt importante pentru teoria particulelor elementare, reprezentările lor utilizându-se în studiul interacţiunilor tari şi electroslabe.

Teorema 6.3. Orice reprezentare de matrici nesingulare, a unui grup finit G poate fi transformată într-o reprezentare unitară, cu ajutorul unei transformări asemenea.

In teoria particulelor elementare este util să se scrie determinantul unei matrici M sub forma [7]

(6.8) $\det M = \exp\{Tr(\ln M)\}$.

Demonstraţie. Exprimăm $\ln M$ sub forma unei dezvoltări în serie

$$\ln M = \ln(1+Q) = Q - \frac{Q^2}{2} + \frac{Q^3}{3} - \ldots$$

şi aducem matricea Q la forma diagonală $\Lambda = UQU^{-1}$, unde $U \in SU(n)$, astfel încât $TrQ = Tr\Lambda$. Notăm cu $\{\lambda_i\}$ elementele de pe diagonala lui Λ şi avem

$$Tr\ln M = Tr\ln(1+Q) = \sum_i \lambda_i - \frac{1}{2}\sum_i \lambda_i^2 + \frac{1}{3}\sum_i \lambda_i^3 + \ldots =$$

$$= \sum_i \ln(1+\lambda_i) = \ln\prod_i (1+\lambda_i) = \ln\det(1+\Lambda) = \ln\det(1+Q),$$

unde 1 este matricea unitate.

Deci

$$\exp\{Tr(\ln M)\} = \det M.$$

(q.e.d.)

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B. GRUPURI SI ALGEBRE LIE

Grupurile Lie prezintă o importanţă deosebită pentru fizica teoretică în care un rol fundamental îl joacă conceptul de simetrie. Noi ne vom limita la cazul grupurilor continue ale căror elemente se obţin prin variaţia continuă a unui număr finit de parametri reali independenţi.

Fie $a(\alpha)= a(\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n)$ elementele grupului generat de parametrii $\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n\}$. Elementul unitate al grupului se ia $e=a(0)$, iar operaţia internă $a(\alpha)a(\beta)=a(\gamma)$ corespunde unei aplicaţii a spaţiului parametrilor în el însuşi

(6.9) $f(\alpha,\beta)=\gamma$,

ce satisface condiţiile

(6.10) $$f(0,\alpha)=f(\alpha,0)$$
$$f(\alpha,f(\beta,\gamma))=f(f(\alpha,\beta),\gamma).$$

In cazul grupurilor Lie, f este o funcţie continuă, diferenţiabilă în raport cu variabilele sale şi deci, se pot folosi metodele analitice în spaţiul abstract al acestor grupuri.

Din punct de vedere al Mecanicii Cuantice suntem interesaţi de reprezentările unitare ale grupurilor Lie. In acest sens, elementul $a(\alpha)$ poate fi scris ca [3], [22]

(6.11) $a(\alpha)= \exp\{i\alpha^j X_j\}$, $j=\overline{1,n}$.

Pentru o transformare infinitezimală $\varphi^i \to \varphi^i + \delta\varphi^i$ elementele (6.11) ale grupului se scriu ca o dezvoltare în serie în vacinătatea unităţii e, neglijându-se puterile superioare ale parametrilor α^j :

(6.12) $a(\alpha)=e+i\alpha^j X_j+...$,

unde mărimile

(6.13) $X_j = -i\frac{\partial a}{\partial \alpha^j}\Big|_{\alpha=0}$, $j=\overline{1,j}$,

definite în elementul unitate $e=a(0)$, poartă numele de generatorii (infinitezimali) ai grupului.

Pentru o reprezentare oarecare, relaţia (6.11) devine

(6.14) $D(a)= \exp\{i\alpha^j T_j\}$, $j=\overline{1,n}$,

unde $T_j \equiv T(X_j)$ sunt n matrici unitare $m \times m$, ce formează o reprezentare a generatorilor infinitezimali ai grupului. Practic, trecerea de la matricile reprezentării grupului, la o reprezentare a generatorilor săi, se face prin aplicaţia exponenţială (6.14). In particular, cele două reprezentări pot avea aceeaşi dimensiune. Mărimile $\{T_j\}_{j=\overline{1,n}}$ generează un spaţiu liniar n-dimensional g, în care vom pune în evidenţă o nouă operaţie internă. In acest scop, utilizând 6.12, calculăm

(6.15) $D(a(\alpha))D(a(\beta))D(a(\alpha))^{-1}D(a(\beta))^{-1} = e + \alpha^i\beta^j(T_iT_j - T_jT_i) + \dots$,

care trebuie să fie, de asemenea, un element al lui G, adică de forma (6.12). Astfel, $T_iT_j - T_jT_i$ este un element al spaţiului liniar g şi deci se exprimă ca o combinaţie liniară de generatorii $\{T_k\}$, adică

(6.16) $T_iT_j - T_jT_i = iC_{ij}^s T_s$.

Prin definiţie, se numeşte comutatorul elementelor T_i, T_j din spaţiul liniar g, elementul

(6.17) $[T_i, T_j] = T_iT_j - T_jT_i$.

Scriind relaţia (6.16) sub forma

(6.18) $[T_i, T_j] = iC_{ij}^s T_s$,

am pus în evidenţă o nouă lege de compoziţie internă în spaţiul liniar g, numită comutator. In cele ce urmează, vom arăta că g este o

algebră Lie. Pentru aceasta vom enunţa următoarele definiţii.

Definiţia 6.3. Un spaţiul liniar L se numeşte algebră liniară, dacă este înzestrat cu încă o operaţie internă, notată $\circ$, care este distributivă la stânga şi la dreapta faţă de adunare, adică

$$\text{(i)} \quad X\circ(Y+Z)=X\circ Y+X\circ Z$$

(6.19)

$$\text{(ii)} \quad (x+Y)\circ Z=X\circ Z+Y\circ Z.$$

Algebrele liniare pot fi asociative şi neasociative. In continuare, vom prezenta o algebră Lie neasociativă.

Definiţia 6.4. Algebra L, în care operaţia internă notată $\circ$ satisface axiomele:

$$\text{(i)} \quad X\circ X=0 \ , \ (\forall)\ X\in L$$

$$\text{(ii)} \quad X\circ(Y\circ Z)+Z\circ(X\circ Y)+Y\circ(Z\circ X)=0,$$

se numeşte algebră Lie.

Teorema 6.4. Intr-o algebră Lie

(6.20) $X\circ Y=-Y\circ X \ , \ (\forall)\ X,Y\in L.$

Demonstraţie. Având în vedere proprietăţile (6.19) şi axioma ii din definiţia 6.4, putem scrie

$$0=(X+Y)\circ(X+Y)= X\circ X+X\circ Y+Y\circ X+Y\circ Y,$$

adică

$$X\circ Y=-Y\circ X. \text{ (q.e.d.)}$$

Teorema 6.5. Dacă în algebra liniară L, operaţia $\circ$ se înlocuieşte cu comutatorul, se obţine o algebră Lie (algebra Lie ataşată).

Demonstraţia este imediată deoarece comutatorul, introdus prin (6.17), satisface axiomele definiţiei 6.4.

Am arătat astfel că spaţiul liniar g, în care introducem comutatorul (6.18), este o algebră Lie, denumită algebra Lie a grupului Lie G. Reprezentările unitare ale acestei algebre sunt deosebit de importante pentru studiul sistematicii particulelor elementare şi a

interacţiunilor dintre acestea.

Datorită corespondenţei biunivoce dintre grupurile Lie conexe şi algebrele Lie asociate lor, putem trece, cu uşurinţă, de la reprezentările unora la reprezentările celorlalte.

Numerele reale $\{C_{ij}^m\}$, din (6.16), au proprietatea

(6.21) $C_{ij}^m = -C_{ji}^m$

şi poartă numele de constante de structură. Identitatea Jacobi scrisă sub forma

(6.22) $[T_i,[T_j,T_m]]+[T_m,[T_i,T_j]]+[T_j,[T_m,T_i]]=0$,

în care ţinem cont de (6.18), ne conduce la următoarea relaţie între constantele de structură:

(6.23) $C_{jm}^s C_{is}^k + C_{ij}^s C_{ms}^k + C_{mi}^s C_{js}^k = 0$.

Practic, se foloseşte un sistem de coordonate în care constantele de structură sunt complet antisimetrice.

Constantele de structură ale unei algebre Lie g generează o reprezentare a acesteia, denumită reprezentarea adjunctă. Intr-adevăr, considerând C_{ij}^m ca fiind componentele unor matrici C_i, putem scrie

(6.24) $[C_i,C_j]=C_{ij}^s C_s$,

care coincide cu (6.18) pentru $C_j=-iT_j$.

Cu ajutorul constantelor de structură, Killing şi Cartan au făcut o clasificare completă a grupurilor Lie simple. In plus, Cartan stabileşte că o condiţie necesară şi suficientă ca un grup Lie să fie semisimplu este ca matricea simetrică $C_{jk}^i C_{si}^k$ să fie nesingulară.

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

C. PROPRIETATILE SPECIFICE COMUTATORULUI A DOI OPERATORI RELATIVE LA ECUATIILE DE FUNCTII SI VALORI PROPRII ALE ACESTORA

Dacă operaţia internă multiplicativă din mulţimea $\Omega(E)$, introdusă prin teoremele 4.7 şi 4.12, este chiar comutatorul a doi operatori, atunci $\Omega(E)$, în raport cu operaţia de sumare, cu noua operaţie internă multiplicativă (comutatorul) şi cu operaţia externă de înmulţire cu scalari, formează o algebră Lie.

Teorema 6.6. Comutatorii satisfac următoarele relaţii:

(6.25)
$$\text{a)}\quad [X,Y+Z]=[X,Y]+[X,Z]$$
$$\text{b)}\quad [X+Y,Z]=[X,Z]+[Y,Z]$$
$$\text{c)}\quad [X,YZ]=[X,Y]Z+Y[X,Z]$$
$$\text{d)}\quad [XY,Z]=[X,Z]Y+X[Y,Z]$$
$$\text{e)}\quad [X,Y^n]=n[X,Y]Y^{n-1}\text{, dacă } [[X,Y],Y]=0.$$

Demonstraţie. Relaţiile a) şi b) coincid cu (6.19) pe care le satisface orice algebră Lie. Relaţiile c) şi d) se verifică direct, deoarece

$$XYZ-YZX=(XY-YX)Z+Y(XZ-ZX)$$

şi respectiv

$$XYZ-ZXY=(XZ-ZX)Y+X(YZ-ZY).$$

Demonstraţia relaţiei e) se face prin inducţie. Astfel, pentru $n=2$ obţinem relaţia c), în care $Y=Z$. Presupunem e) adevărată pentru n şi trecem la $n+1$. Atunci, utilizând c), obţinem

$$[X,Y^{n+1}]=[X,Y^n]Y+Y^n[X,Y]=$$

$$=n[X,Y]Y^n+Y^n[X,Y]=(n+1)[X,Y]Y^n.$$

(q.e.d.)

In continuare, vom prezenta unele proprietăţi ale comutatorului

BCU IASI - CENTRUL UNIVERSITAR - BIBLIOTECA

relative la ecuaţiile de funcţii şi valori proprii ale celor doi operatori.

Teorema 6.7. Dacă elementele şirului total $\{\chi_i\}$, dintr-un spaţiu Hilbert E, sunt vectori proprii atât ai operatorului $\hat{A}$, cât şi ai operatorului $\hat{B}$, atunci $[\hat{A},\hat{B}]=0$.

Demonstraţie. Alegând şirul $\{\chi_i\}$ ca bază în spaţiul Hilbert E, putem scrie orice $\psi \in E$ sub forma

(6.26) $\psi = \sum_i c_i \chi_i$.

Dar, prin ipoteză, avem

(6.27) $\hat{A}\chi_i = a_i\chi_i$ şi $\hat{B}\chi_i = b_i\chi_i$.

Calculăm

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\hat{B}\sum_i c_i\chi_i = \sum_i c_i\hat{A}\left(\hat{B}\chi_i\right) = \sum_i c_i b_i\left(\hat{A}\chi_i\right) = \sum_i c_i b_i a_i \chi_i$$

şi respectiv

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \sum_i c_i a_i b_i \chi_i .$$

Deci, pentru orice $\psi \in E$ avem

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0,$$

adică

$$[\hat{A},\hat{B}]=0. \text{ (q.e.d.)}$$

Teorema 6.8. Fie $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ doi operatori autoadjuncţi şi complet continui, comutativi, fiecare având vectori proprii care formează şiruri totale. Atunci se poate găsi un şir total $\{\psi_i\}$ ale cărui elemente sunt vectori proprii comuni lui $\hat{A}$ şi $\hat{B}$.

Demonstraţie. Conform ipotezei,

(6.28) $[\hat{A},\hat{B}]=0$ sau $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, ţinând cont de teorema 5. , există şirul $\{\varphi_{i,k}\}_{k=1,2,...,n_i}$ pentru care

(6.29) $\hat{B}\varphi_{i,k}=b_i\varphi_{i,k}$, $b_i\neq b_j$ $pt.i\neq j$

Din (6.28) şi (6.29), obţinem

(6.30) $\hat{B}\left(\hat{A}\varphi_{i,k}\right)=\hat{A}\left(\hat{B}\varphi_{i,k}\right)=\hat{A}\left(b_i\varphi_{i,k}\right)=b_i\hat{A}\varphi_{i,k}$,

deci $\hat{A}\varphi_{i,k}$ este vector propriu al lui $\hat{B}$, aparţinând valorii proprii b_i. Cum lui b_i îi corespunde un număr finit de vectori proprii liniar independenţi $\varphi_{i,1},...,\varphi_{i,n_i}$, rezultă

(6.31) $\hat{A}\varphi_{i,k}=\sum_{r=1}^{n_i}c_{kr}\varphi_{i,r}$.

Dacă $n_i=1$, atunci $\varphi_{i,k}$ este şi vector propriu al lui $\hat{A}$. In caz contrar, considerăm vectorii

(6.32) $\sigma_{i,j}=\sum_{s=1}^{n_i}d_{js}\varphi_{i,s}$, cu $\det d_{js}\neq 0$,

care sunt vectori proprii ai operatorului $\hat{B}$, şi determinăm coeficienţii d_{js} astfel ca $\sigma_{i,j}$ să fie şi vectori proprii ai operatorului $\hat{A}$. In acest scop, avem

(6.33) $\hat{A}\sigma_{i,j}=\sum_{s=1}^{n_i}d_{js}\left(\hat{A}\varphi_{i,s}\right)=\sum_{s=1}^{n_i}\sum_{r=1}^{n_i}d_{js}c_{sr}\varphi_{i,r}$

şi impunând

(6.34) $\hat{A}\sigma_{i,j}=a_i\sigma_{i,j}$,

adică

(6.35) $A\sigma_{i,j}=\sum_{s=1}^{n_i}a_id_{js}\varphi_{i,s}=\sum_{s=1}^{n_i}\sum_{r=1}^{n_i}a_id_{js}\varphi_{i,r}\delta_{sr}$,

B.C.U. „M. EMINESCU" IAŞI

obţinem din (6.33) şi (6.35)

$$(6.36)\quad \sum_{r=1}^{n_i}\left[\sum_{s=1}^{n_i}(c_{sr}-a_i\delta_{sr})d_{js}\right]\varphi_{i,r}=0.$$

Vectorii $\varphi_{i,r}$ fiind liniar independenţi, rezultă

$$(6.37)\quad \sum_{s=1}^{n_i}(c_{sr}-a_i\delta_{sr})d_{js}=0,$$

care este un sistem liniar şi omogen pentru necunoscutele $d_{j1},...,d_{jn_i}$. Pentru a găsi soluţii nebanale trebuie ca

$$\det(c_{sr}-a_i\delta_{sr})=0.$$

Soluţiile a_i ale acestei ecuaţii de grad n_i sunt valorile proprii ale operatorului $\hat{A}$. Pentru fiecare soluţie, sistemul (6.37) determină d_{js}.

Astfel obţinem şirul vectorilor proprii comuni operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$, $\{\sigma_{ij}\}$, pe care, renumerotându-l cu un singur indice, îl notăm cu $\{\psi_i\}$. (q.e.d.)

Teorema 6.9. Dacă $\hat{A}^+=\hat{A}$, $\hat{B}^+=\hat{B}$ şi $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$, atunci operatorii $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ nu pot avea un set total de funcţii proprii comune.

Demonstraţie. Presupunem că operatorii autoadjuncţi $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ au setul total $\{\psi_i\}$ de funcţii proprii comune, deci

$$\hat{A}\psi_i=a_i\psi_i \text{ şi } \hat{B}\psi_i=b_i\psi_i.$$

Atunci, din

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_i)=a_ib_i\psi_i \text{ şi } \hat{B}(\hat{A}\psi_i)=b_ia_i\psi_i$$

obţinem, ţinând cont de teorema 4.4, că

$$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A},$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ceea ce contrazice ipoteza

$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ adică $\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$. (q.e.d.)

Următoarea teoremă, pe care o enunţăm fără demonstraţie, stabileşte o legătură importantă între un operator mărginit şi un set complet de operatori.

Teorema 6.10. Dacă un operator mărginit $\hat{A}$, definit pe un spaţiu Hilbert, comută cu operatorii $A_1,...,A_n$, unde $\{A_1,...,A_n\}$ este un set complet de operatori, atunci A este o funcţie de $A_1,...,A_n$ [49].

In încheierea acestui paragraf vom prezenta relaţiile de comutare satisfăcute de operatorii coordonată şi impuls introduşi prin relaţiile (6.20.a) şi respectiv (6.14.a). O proprietatea deosebit de importantă a acestora este aceea că toţi operatorii coordonată comută între ei şi, de asemenea, toţi operatorii impuls:

$$[\hat{x}^a,\hat{x}^b]=0$$

(6.38) $$a,b=1,...,f$$

$$[\hat{p}_a,\hat{p}_b]=0.$$

Pe de altă parte, operatorul coordonată a unei particule comută cu orice operator impuls al acesteia, cu excepţia celui aparţinând aceleiaşi componente. Aceasta poate fi verificată imediat calculând

$$x^a\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}\right)\psi(x^1,..,x^a,x^f)-\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}\right)(x^a\psi(x^1,..,x^a,..,x^f))=$$
$$=-\frac{\hbar}{i}\psi(x^1,..,x^a,..,x^f),$$

pentru o funcţie diferenţiabilă ψ.

In concluzie, operatorii coordonată şi impuls satisfac următoarele relaţii de comutare

(6.39) $$[\hat{x}^a,\hat{p}_b]\psi=-\frac{\hbar}{i}\delta^a_b\psi$$

corespunzătoare "părţii discrete" a spectrului acestor operatori.

In cele ce urmează, pentru a surprinde mai bine aspectele esenţiale din cadrul interpretării fizice a formalismului mecanicii ondulatorii, ne vom referi cu predilecţie la cazul spectrului discret al observabilelor ce posedă un set complet (ortonormat) de funcţii proprii în $\mathcal{L}^2(D\subseteq\mathbb{R}^3)$.

A. DEFINITIA VALORII MEDII

Fie în spaţiul de configuraţie $\mathbb{R}^3$ un sistem fizic uniparticulă având coordonatele naturale $\{x^a\}_{a=\overline{1,3}}$ drept grade de libertate şi fiind caracterizat (într-o manieră oarecare) de observabila $\hat{A}$ cu spectrul discret $\Sigma(\hat{A})=\{\alpha_n\}_{n=\overline{1,\infty}}\subset\mathbb{R}$ şi setul total de funcţii proprii

$$\underline{B}[\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)]=\left\{\chi_{n\mu}\in E_n(\hat{A})\mid \mu=\overline{1,g(n)}\right\}_{n=\overline{1,\infty}},$$

care formează o bază ortonormală, deci

$$(7.1)\qquad (\chi_{n\mu},\chi_{m\nu})=\int_{\mathbb{R}^3}\chi^*_{n\mu}\chi_{m\nu}d^3x=\delta_{nm}\delta_{\mu\nu},$$
$$(\forall)\,\mu=\overline{1,g(n)},\nu=\overline{1,g(m)}\ ;\ n,m\in\mathbb{N}^*$$

în spaţiul Hilbert (separabil)

$$(7.2)\qquad \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)=\bigoplus_{n=1}^{\infty}E_n(\hat{A})=E_{\alpha_1}(\hat{A})\oplus E_{\alpha_2}(\hat{A})\oplus\ldots\oplus E_{\alpha_n}(\hat{A})\oplus\ldots.$$

Avem deci

$$(7.3)\qquad \hat{A}\chi_{n\mu}=\alpha_n\chi_{n\mu},\quad \text{pt.}\,(\forall)\,\alpha_n\in\Sigma(\hat{A})$$
$$\text{şi}\,\chi_{n\mu}\in E_n(\hat{A})\subset\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3),\ \text{cu}\,\mu=\overline{1,g(n)}.$$

Coroborând teorema 5.32 cu procesul fizic de măsurare a mărimii A, rezultă că aceasta, la efectuarea unei măsurători, în orice stare cuantică a

microparticulei, nu va putea lua decât una din valorile proprii α_n ale operatorului autoadjunct $\hat{A}$ asociat ei. Cu alte cuvinte, în microcosmos o observabilă A (sau $\hat{A}$) nu poate avea alte valori decât cele aparţinând spectrului $\Sigma(\hat{A})$ al ei.

Dacă $\Psi(\vec{x},t):\mathbb{R}^3 x\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ este o funcţie de stare a microparticulei, atunci la un moment dat t_0-0, considerat iniţial şi imediat înaintea efectuării unei măsurători a observabilei A, funcţia $\Psi(\vec{x},t_0-0):\mathbb{R}^3\to\mathbb{C}$ va aparţile clasei de echivalenţă ψ din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$, adică va fi reprezentată în raport cu baza ortonormală de funcţii proprii ale lui $\hat{A}$ prin relaţia

$$(7.4)\qquad \psi=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} c_{n\mu}\chi_{n\mu},$$

cu

$$(7.5)\qquad c_{n\mu}=(\chi_{n\mu},\psi)=\int_{\mathbb{R}^3}\chi^*_{n\mu}\psi\, d^3x\ ,\ (\forall)\,\mu=\overline{1,g(n)};n\in\mathbb{N}^*$$

şi va satisface condiţia de normare

$$(7.6)\qquad \int_{\mathbb{R}^3}\Psi^*(\vec{x},t_0-0)\Psi(\vec{x},t_0-0)d^3x=(\psi,\psi)=\int_{\mathbb{R}^3}\psi^*\psi\, d^3x=1.$$

Explicitând, cu ajutorul relaţiilor (7.4), (7.1), relaţia (7.6), avem

$$\int_{\mathbb{R}^3}\psi^*\psi\, d^3x=\int_{\mathbb{R}^3}\left\{\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}c^*_{n\mu}\chi^*_{n\mu}\right\}\cdot\left\{\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{\nu=1}^{g(m)}c_{m\nu}\chi_{m\nu}\right\}d^3x=$$

$$(7.7)\qquad =\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\sum_{\nu=1}^{g(m)}c^*_{n\mu}c_{m\nu}\left\{\int_{\mathbb{R}^3}\chi^*_{n\mu}\chi_{m\nu}d^3x\right\}=$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\sum_{\nu=1}^{g(m)}c^*_{n\mu}c_{m\nu}\delta_{nm}\delta_{\mu\nu}=1,$$

adică obţinem relaţia deosebit de importantă pentru cele ce vor urma

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITARY

Reprezentările sunt clasificate conform

Teoremei 6.12. *(von Neumann).* Toate reprezentările ireductibile ale relaţiilor canonice de comutare (6.48) pe un spaţiu Hilbert separabil sunt unitar echivalente, adică

$$\hat{q}_a = U\hat{q}_a U^{-1},\ \hat{p}_b = U\hat{p}_b U^{-1}, \tag{6.49}$$

$$a,b=1,...,f,\ U=\text{operator unitar.}$$

Orice reprezentare reductibilă pe un spaţiu Hilbert separabil este o sumă directă de reprezentări ireductibile.

Demonstraţiile teoremelor 6.11 şi 6.12, pe care nu am considerat absolut necesare să le reproducem aici, pot fi consultate în tratatul [50].

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

V.7. Expresia valorii medii a unei observabile în formalismul Schrödinger. Derivarea operatorilor în raport cu timpul şi teoremele lui Ehrenfest

După ce în paragrafele anterioare am prezentat elementele fundamentale ale aparatului matematic utilizat în formalismul Schrödinger, în acest paragraf vom expune bazele metodei de interpretare fizică a rezultatelor acestui formalism, care conferă Mecanicii Cuantice putere praxiologică.

Pentru început, vom reaminti că, în ce priveşte semnificaţia fizică (primară) a elementelor spaţiului Hilbert $\mathfrak{L}^2(D\subset\mathbb{R}^3)$, starea cuantică a unei particule (scalare) este descrisă de o funcţie complexă $\Psi(\vec{x},t):D\times\mathbb{R}\to\mathbb{C}$, care aparţine, în orice moment t, unei clase de echivalenţă ψ din $\mathfrak{L}^2(D)$ şi care este univoc determinată printr-un procedeu cu deplină justificare fizică, de exemplu, prin impunerea condiţiei de a fi o soluţie regulată (în sensul respectării condiţiilor standard impuse funcţiei de undă) a ecuaţiei de evoluţie dată de Schrödinger. Referitor la semnificaţia fizică a operatorilor, vom numi observabilă orice mărime măsurabilă în principiu, ce caracterizează un sistem fizic, căruia i se poate asocia, prin aplicarea Principiului de Corespondenţă, un operator autoadjunct în spaţiul Hilbert $\mathfrak{L}^2$ al stărilor sistemului.

Deşi sub aspect matematic, aceasta este mai mult o descriere dată observabilei decât o definiţie a ei, din punct de vedere fizic ea este suficientă (şi unanim acceptată), deoarece impunerea unor condiţii suplimentare, care să întărească rigurozitatea definiţiei, cum ar fi de exemplu condiţia ca observabila să aibă un set total de funcţii proprii în spaţiul în care acţionează, poate conduce (uneori) la situaţii "paradoxale", dat fiind că (de exemplu) funcţiile proprii ale operatorilor fundamentali $\hat{x}$ şi $\hat{p}$ nu sunt din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$. Oricum, în baza teoremelor 5.30 şi 5.32, această condiţia suplimentară este verificată de operatorii autoadjuncţi complet continui care au un şir infinit de valori proprii şi poate fi de asemenea verificată în cazul operatorilor autoadjuncţi, cu spectru mixt prin restricţionarea spaţiului Hilbert la subspaţiul sumelor directe, formula (5.127), ale tuturor spaţiilor α-caracteristice

numite relaţii de comutare canonice.

In general, daţi $2f$ operatori autoadjuncţi $\hat{q}^1,...,\hat{q}^f,\hat{p}_1,...,\hat{p}_f$ într-un spaţiu Hilbert, se spune că ei satisfac relaţiile de comutare canonice, dacă

(6.40) $$\left[\hat{q}^a,\hat{p}_b\right]\psi=-\frac{\hbar}{i}\delta^a_b\psi$$

pentru orice funcţie ψ aparţinând domeniului de definiţie al comutatorului. Relaţia precedentă se scrie, în mod simbolic, sub forma

(6.41) $$\left[\hat{q}^a,\hat{p}_b\right]=-\frac{\hbar}{i}\delta^a_b \quad , a,b=1,...,f$$

şi ea arată că perechile $\left\{\hat{q}^i,\hat{p}_i\right\}$, numite canonic conjugate, nu comută, în timp ce orice alţi doi operatori din $\left\{q^1,...,q^f,p_1,...,p_f\right\}$ comută.

Dacă $\hat{Q}$ şi $\hat{P}$ sunt o pereche canonic conjugată de operatori mărginiţi, atunci înlocuind comutatorul (6.41) în teorema 6.6.e, obţinem relaţia

(6.42) $$[\hat{Q},\hat{P}^n]=-\frac{\hbar}{i}n\hat{P}^{n-1}$$

care, utilizată în dezvoltarea în serie a lui $e^{i\alpha\hat{P}}(\alpha\in\mathbb{R}^1)$, ne conduce la

(6.43) $$[\hat{Q},e^{i\alpha\hat{P}}]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}[\hat{Q},\hat{P}^n]=-\hbar\alpha e^{i\alpha\hat{P}}.$$

Procedând în mod analog pentru dezvoltarea în serie a lui $e^{i\beta\hat{Q}}$ şi multiplicând expresiile obţinute cu $e^{-i\alpha\hat{P}}$ la stânga şi $e^{i\alpha\hat{P}}$ la dreapta, obţinem *relaţia lui Weyl*

(6.44) $$e^{i\beta\hat{Q}}e^{i\alpha\hat{P}}=e^{-i\hbar\alpha\beta}e^{i\alpha\hat{P}}e^{i\beta\hat{Q}} \quad , \alpha,\beta\in\mathbb{R}^1.$$

Deci, pentru operatori mărginiţi pe întreg spaţiu Hilbert, relaţia de

comutare canonică $[\hat{Q},\hat{P}]=-\frac{\hbar}{i}$ se se poate înlocui cu relaţia lui Weyl (6.44).

Familia de operatori unitari

(6.45) $$U_\alpha=e^{i\alpha\hat{A}}\quad,\quad \alpha\in\mathbb{R}^1$$

satisface proprietăţile $U_0=1$, $U_\alpha^{-1}=U_{-\alpha}$, $U_\alpha U_\beta=U_\beta U_\alpha$ şi deci formează un grup abelian a cărui elemente se obţin prin variaţia continuă a parametrului α.

Teorema 6.11. (*Stone*). Fiecărei familii continue uniparametrică $U_\alpha, \alpha\in\mathbb{R}^1$, de operatori unitari pe spaţiul Hilbert, satisfăcând relaţia

(6.46) $$U(\alpha+\beta)=U(\alpha)U(\beta),$$

îi corespunde un operator autoadjunct unic A, astfel încât

(6.47) $$U(\alpha)=e^{i\alpha\hat{A}}\quad,$$

pentru toţi $\alpha\in\mathbb{R}^1$.

Observăm că familia de operatori (6.45) satisface axiomele din definiţia 6.2 şi deci formează o reprezentare a unui grup Lie uniparametric, $\hat{A}$ fiind operatorul autoadjunct corespunzător generatorului algebrei Lie asociate. Se poate trata problema reprezentărilor relaţiilor de comutatori (6.41) în termeni de familii de operatori continuu uniparametrice $\{e^{i\alpha q^a}, e^{i\alpha p_b}, a,b=1,...,f\}$, înlocuind relaţiile (6.41) cu formula lui Weyl (6.44) astfel

(6.48) $$e^{i\alpha^a\hat{q}_a}\cdot e^{i\beta^b\hat{p}_b}=e^{-i\hbar\delta_{ab}\alpha^a\beta^b}e^{i\beta^b\hat{p}_b}e^{i\alpha^a\hat{q}_a}\quad,$$

$$\alpha^a,...,\alpha^f,\beta^a,...,\beta^f\in\mathbb{R}^1.$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(7.8)\quad \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}|c_{n\mu}|^2=1,$$

care se poate scrie în mod echivalent şi sub forma

$$(7.9)\quad \sum_{n=1}^{\infty}\wp_n=1$$

cu

$$(7.10)\quad \wp_n=\sum_{\mu=1}^{g(n)}|c_{n\mu}|^2.$$

Inainte de a trece la interpretarea ecestor două relaţii, să mai observăm că, prin înlocuirea expresiei (7.5) a coeficienţilor $c_{n\mu}$ ai dezvoltării (7.4), în relaţia (7.8), aceasta devine

$$(7.11)\quad \int_{\mathbb{R}^3x\mathbb{R}^3}\psi^*(\vec{x}')\left[\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\chi_{n\mu}(\vec{x})\right]\psi(\vec{x})d^3xd^3x'=1\ ,$$

$$(\forall)\,\psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3).$$

Rezultă relaţia

$$(7.12)\quad \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\chi_{m\mu}(\vec{x})=\delta(\vec{x}'-\vec{x}),$$

care reprezintă tocmai teorema de închidere (sau completitudine) a vectorilor proprii $\left\{\chi_{n\mu}\in E_n(\hat{A})\,|\,\mu=1,g(n)\right\}_{n=\overline{1,\infty}}$ (ai lui $\hat{A}$) care formează baza ortonormală $\mathcal{B}[\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)]$ în spaţiul Hilbert (7.2).

Pentru interpretarea fizică a rezultatelor (7.8), (7.9), (7.10) să considerăm mai întâi cazul cel mai simplu, când observabila $\hat{A}$ are spectrul discret $\Sigma(\hat{A})$ nedegenerat, adică $g(n)=dim\,E_{\alpha_n}(\hat{A})=1$, $(\forall)\ n\in\mathbb{N}^*$. In această situaţie, relaţia (7.10) devine

$$(7.13)\quad \wp_n=|c_n|^2,$$

astfel încât, relaţiile (7.9) şi (7.8) se scriu sub forma

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(7.14) $\sum_{n=1}^{\infty} \wp_n = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$,

iar funcţia de stare Ψ la momentul t_0-0 (imediat înaintea măsurării observabilei A) are expresia

(7.15) $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \chi_n$, cu $c_n = (\chi_n, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \chi_n^* \psi \, d^3x$, $(\forall) n \in \mathbb{N}^*$.

Dacă ψ ar coincide cu unul din vectorii proprii ai lui $\hat{A}$, să zicam χ_k, atunci ori de câte ori am determina mărimea A pentru particula considerată, am obţine valoarea α_k deoarece, dacă $\psi = c\chi_k$, unde $c \in \mathbb{C}$, atunci $c_k = c$ şi $c_m \equiv 0$ pt. $(\forall) m \neq k$, iar din relaţiile (7.13), (7.14) avem

$$\wp_k = |c_k|^2 = |c|^2 = 1 \text{ şi } \wp_m \equiv 0 \text{ pt. } (\forall) m \neq k.$$

Cum însă, în general, starea cuatică ψ a particulei nu este o stare proprie a observabilei $\hat{A}$, rezultă că la efectuarea unei măsurători la momentul t_0, a mărimii fizice A, în starea ψ, vom obţine "la întâmplare" una din valorile proprii, de exemplu α_j, ale observabilei $\hat{A}$, iar starea iniţială $\Psi(t_0-0) = \Psi$ va "colapsa" (instantaneu) la starea proprie finală $\Psi(t_0+0) = \chi_j$ corespunzătoare valorii (proprii) măsurate α_j. Cu alte cuvinte, procesul fizic de măsurare a mărimii A va induce o tranziţie cuantică de la starea iniţială ψ (de forma (7.15)) la starea finală $\Psi(t_0+0)$ reprezentată de una din funcţiile proprii, de exemplu χ_j, ale observabilei $\hat{A}$, iar amplitudinea acestei tranziţii, definită ca proiecţia stării iniţiale pe starea finală, este dată evident de chiar coeficientul

$$c_j = (\chi_j, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \chi_j^* \psi \, d^3x.$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Din relaţia (7.13) rezultă imediat că numărul real şi pozitiv

$$\wp_j = |c_j|^2$$

va reprezenta modulul pătrat al amplitudinii de tranziţie de la ψ la χ_j, iar dacă $\Psi(t_0-0)=\psi$ nu este o stare proprie a observabilei $\hat{A}$, atunci în mod obligatoriu, după cum se observă din relaţia (7.14), $0 \le \wp_j < 1$. Intuitiv începe să devină clar, pe măsură ce $\wp_j \to 1$, în aceeaşi măsură tranziţia $\psi \to \chi_j$ are tot mai multe şanse să se realizeze (la o testare a observabilei A în starea iniţială ψ a particulei) şi dacă valoarea $\alpha_j \in \Sigma(\hat{A})$ devine tot mai probabilă ca valoare ce va fi măsurată la momentul t_0 pentru mărimea fizică A. De asemenea, putem intui că dacă două tranziţii posibile, din starea iniţială ψ, de exemplu $\psi \to \chi_m$ şi $\psi \to \chi_n$, sunt astfel încât $0 \le \wp_m < \wp_n < 1$, atunci obţinerea valorii α_m va fi cu mult mai improbabilă decât obţinerea valorii α_n. Ajungem astfel, prin acest raţionament de plauzabilitate, la concluzia că $\wp_n = |c_n|^2$ reprezintă probabilitatea de realizare a stării proprii χ_n şi a valorii proprii α_n a observabilei $\hat{A}$ la o testare a acesteia când sistemul (particula) se află la un moment imediat anterior măsurătorii în starea cuantică $\Psi(t_0-0)=\psi$ de coeficienţi $\{c_m = (\chi_m, \psi) \in \mathbb{C}\}_{m=\overline{1,\infty}}$.

Desigur, cineva s-ar putea întreba de ce am "alambicat" atât de mult expunerea acestei chestiuni, când de fapt am fi putut spune că prin efectuarea a N măsurători ale observabilei A în starea cuantică ψ, dată de (7.15), vom obţine de N_1 ori valoarea α_1, de N_2 ori valoarea α_2 ş.a.m.d., astfel încât $N_m < N_n$ dacă $|c_m| < |c_n|$ şi deci pentru $N \to \infty$ frecvenţa de apariţie $\frac{N_n}{N}$ a valorii

(proprii) α_n va tinde la $\wp_n = |c_n|^2$, adică

$$(7.16)\quad \lim_{N\to\infty} \frac{N_n}{N} = \wp_n = |c_n|^2,$$

şi cum relaţia (7.14) este totdeauna valabilă (pentru $\psi \in \mathfrak{L}^2$), rezultă semnificaţia probabilistă a fiecăreia din valorile $\left\{\wp_n = |c_n|^2\right\}_{n=\overline{1,\infty}}$.

Răspunsul este următorul : raţionamentul efectuat în enunţul întrebării este corect din punct de vedere formal dar, dată fiind "alura" sa puternic convenţionalistă sub aspect statistic, el este prezentat în destul de multe lucrări de Mecanică Cuantică. Principial însă, acest raţionament este cel puţin incomplet, deoarece nu ia în considerare "colapsarea" observată experimental a stării cuantice iniţiale ψ la starea proprie finală, să spunem χ_n (a observabilei A), realizată imediat după efectuarea măsurătorii prin care s-a obţinut valoarea (proprie) α_n. Cum χ_n este o stare proprie efectiv realizată la momentul t_0+0, rezultă că, în lipsa unor perturbaţii care să scoată sistemul din această stare, orice măsurătoare am efectua asupra mărimii fizice A la momentele $t>t_0+0$ va conduce tot la valoarea α_n şi nu la valorile diferite $\alpha_{n'}, \alpha_{n''}$ etc. pe care să le obţinem de $N_{n'}, N_{n''}$ ş.a.m.d. ori, astfel încât să putem defini frecvenţele de apariţie ale acestora şi corespunzător, prin trecere la limită, probabilităţile lor de apariţie. Pe de cealaltă parte, dacă siastemul este supus continuu unui câmp perturbator, el îşi va schimba continuu starea cuantică ψ şi deci, la efectuarea de măsurători ale observabilei A la diverse momente $t_1,...,t_N$, etc., ulterioare momentului t_0+0, deci vom obţine de exemplu de N_n ori valoarea proprie α_n, numărul de partiţii N_n ale acesteia nu mai poate fi pus în corespondenţă directă cu coeficientul $|c_n| = |(\chi_n, \psi)|$, deoarece acesta fiind continuu variabil, nu va mai avea aceeaşi valoare în fiecare din momentele când am determinat valoarea α_n.

Concilierea raţionamentului de plauzabilitate, prezentat anterior, cu raţionamentul pe care tocmai l-am discutat, se poate face în aşa fel încât primul să "câştige" din consistenţa statistică, sub aspectul relaţiilor utilizate, a celui de al doilea, iar acesta să capete caracterul principial necontradictoriu al celui dintâi. In acest sens, este suficient să ne imaginăm sistemul considerat în starea iniţială ψ multiplicată de N ori, cu N suficient de mare, şi să presupunem că toate cele N copii ale sistemului sunt mutual complet neinteractive, astfel încât testarea observabilei A la acelaşi moment t_0 va realiza în mod independent oricare din stările proprii (finale) $\{\chi_n\}$ cu valorile corespunzătoare $\{\alpha_n\}$ în câte $\{N_n\}$ din cele N copii ale sistemului considerat. Acum este natural să presupunem că dacă de exemplu $|c_n|>|c_m|$, atunci numărul de copii N_n în care s-a realizat starea finală χ_n şi valoarea α_n a lui A este mai mare decât numărul de copii N_m în care s-a realizat starea χ_m şi valoarea α_m a observabilei A. Rezultă astfel că toate frecvenţele de apariţie $\nu_n(N)=N_n/N$ sunt evaluate în acelaşi moment $t=t_0+0$, în toate copiile sistemului, încât nu mai are nici o importanţă că starea iniţială a colapsat în diversele stări $\{\chi_n\}$, sau că sistemul (şi copiile sale) se află în permanenţă într-un câmp perturbator (multiplicat aidoma în copiile sistemului).

Să trecem acum la interpretarea formulelor (7.8), (7.9), (7.10) în cazul mai general când observabila $\hat{A}$ are un spectru discret degenerat $\Sigma(\hat{A})$, ordinul degenerării (sau multiplicitatea) valorii principale α_n, cu $n\in\mathbb{N}^*$, fiind (respectiv) $g(n)=\dim E_n(\hat{A})<\infty$.

In situaţia în care, cu ajutorul unui câmp perturbator suficient de slab, ridicăm uşor, dar complet, degenerarea fiecărui "nivel" α_n, adică în despicăm în $g(n)$ "subnivele" distincte corespunzătoare valorii proprii $\{\alpha_{n\mu}\}_{\mu=\overline{1,g(n)}}$ suficient de apropiate între ele şi, în acelaşi timp, suficient de apropiate de

nivelul "inițial" α_n, adică $\sup\limits_{\mu,\nu}\left\{\left|\frac{\alpha_{n\mu}-\alpha_{n\nu}}{\alpha_n}\right|\right\}<1$, cu $\mu,\nu=1,2,...,g(n)$, astfel încât să nu perturbăm sensibil funcțiile proprii $\{\chi_{n\mu}\}_{\mu=\overline{1,g(n)}}$ care formează o bază ortonormală în $E_n(\hat{A})$, atunci, în urma efectuării unei măsurători a observabilei $\hat{A}$, vom putea decela efectiv oricare din stările finale $\chi_{m\rho}$, cu $\rho\in[1,g(m)]$, pe care le-a realizat sistemul "când a produs" valoarea $\alpha_m\in\Sigma(\hat{A})$. In acord cu cele discutate la cazul spectrului discret nedegenerat, rezultă că sistemul, aflat la momentul t_0-0 în starea ψ, dată de (7.4), a suferit o tranziție de amplitudine

$$c_{m\rho}=(\chi_{m\rho},\psi)=\int_{\mathbb{R}^3}\chi^*_{m\rho}\psi\,d^3x,$$

în starea proprie finală, de la momentul t_0+0 $\chi_{m\rho}$, pentru care se înregistrează valoarea $\alpha_{m\rho}\cong\alpha_m$ a mărimii fizice A. Putem trage atunci următoarea concluzie : dacă prin configurația experimentului putem decela "oricât de puțin" fiecare din stările proprii ale observabilei $\hat{A}$ în fiecare din subspațiile α-caracteristice ale ei, atunci $|c_{n\mu}|^2$, cu $\mu\in\{1,2,...,g(n)\}$ și $n\in\mathbb{N}^*$, reprezintă probabilitatea ca la o testare a variabilei A, când sistemul se afla în momentul t_0-0 în stare cuantică ψ (dată de formula 7.4), să obținem valoarea α_n și să "lăsăm" sistemul, la momentul t_0+0, în starea $\chi_{n\mu}$.

Dacă din contra, nu ridicăm deloc degenerarea valorilor proprii ale observabilei $\hat{A}$, atunci este aproape evident că în urma unei măsurători a aceasteia, vom obține, de exemplu, valoarea α_n dar nu vom mai ști în care din stările proprii $\chi_{n\mu}$, cu $\mu=\{1,2,...,g(n)\}$, din spațiul α_n-caracteristic $E_n(\hat{A})$,

BCU "ALEXANDRU IOAN CUZA" UNIVERSITY LIBRARY

s-a plasat sistemul. Rezultă atunci, inspectând formula (7.10), că trebuie să acordăm o pondere aprioric egală tuturor celor $g(n)$ stări proprii ortonormale $\{\chi_{n\mu} \mid \mu=\overline{1,g(n)}\}$ din $E_n(\hat{A})$, adică

(7.17) $|c_{n1}|=\ldots=|c_{ng(n)}|=|c_n|$,

şi astfel, obţinem pentru relaţiile (7.9), (7.10) expresiile particulare:

(7.18)

a) $$\sum_{n=1}^{\infty} g(n)|c_n|^2=1 \ .$$

b) $$\wp_n=g(n)|c_n|^2 \ .$$

Interpretarea relaţiilor (7.18) are la bază faptul că semnificaţia fizică directă, legată de procesul de măsură, are numai mărimea $\wp_n$, aceasta reprezentând probabilitatea de realizare, la momentul $t_0\neq 0$, a valorii proprii α_n şi a unei stări proprii oarecare din $E_n(\hat{A})$, atunci când la momentul t_0 s-a efectuat o testare a observabilei A, cu degenerarea complet neridicată, pentru sistemul aflat iniţial, la t_0-0, în starea ψ de forma (7.4) şi cu coeficienţii (7.17). Evident, din punct de vedere pur statistic, $|c_n|=|c_{n1}|=\ldots=|c_{ng(n)}|^2$ reprezintă probabilitatea ca la momentul t_0+0 sistemul să fie lăsat "exact" într-una din stările proprii ortonormale $\chi_{n\mu}$, din $E_n(\hat{A})$. Din punct de vedere fizic, aceasta este neesenţială deoarece degenerarea fiind totală nu vom putea decela nici una din stările $\chi_{n\mu}$.

In încheierea acestui subparagraf, să stabilim, utilizând rezultatele (7.1)-(7.10) şi interpretarea fizică dată acestora, relaţia de definiţie în Mecanica Cuantică a valorii medii a unei observabile.

Din statistica clasică se ştie că, dacă o mărime fizică A poate lua un şir de valori $\{\alpha_n\}$, cu probabilităţile corespunzătoare $\{\wp_n\}$, atunci, prin

definiţie, valoarea medie a mărimii A este numărul real

(7.19) $$\langle A\rangle = \sum_n \wp_n \alpha_n .$$

Să presupunem că observabila A este de tipul celei discutate până acum şi că funcţia de stare $\Psi(\vec{x},t)$ asociată microparticulei admite în orice moment t o dezvoltare de tipul (7.4) adică, în reprezentare de configuraţie şi în spaţiul Hilbert $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}^3)$ definit prin relaţia (7.2), ea se va scrie sub forma

(7.20)
$$\Psi(\vec{x},t) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} c_{n\mu}(t)\chi_{n\mu}(\vec{x}),$$
$$c_{n\mu} = \left(\chi_{n\mu}, \Psi(\vec{x},t)\right) = \int_{\mathbb{R}^3} \chi^*_{n\mu}(\vec{x})\Psi(\vec{x},t)d^3x.$$

In baza echivalenţei relaţiilor (7.8) şi (7.9), rezultă că mărimea

(7.21) $$\wp_n(t) = \sum_{\mu=1}^{g(n)} |c_{n\mu}(t)|^2$$

reprezintă probabilitatea ca la momentul t observabila să ia valoarea α_n corespunzătoare subspaţiului caracteristic $E_n(\hat{A})$ căruia îi aparţine starea "colapsată"

(7.22) $$\Psi_n(\vec{x},t) = \sum_{\mu=1}^{g(n)} c_{n\mu}\chi_{n\mu}(\vec{x}).$$

Inlocuind în (7.19) expresia (7.21) şi având în vedere forma (7.20) a coeficienţilor $c_{n\mu}(t)$, obţinem

(7.23)
$$\langle A\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} |c_{n\mu}(t)|^2 \cdot \alpha_n =$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\chi_{n\mu}(\vec{x})d^3x \int_{\mathbb{R}^3} \chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\Psi(\vec{x}',t)d^3x' \cdot \alpha_n$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, având în vedere relaţia (7.3) şi caracterul autoadjunct al operatorului $\hat{A}$, vom avea

$$
\begin{aligned}
<A> &= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\alpha_n \chi_{n\mu}(\vec{x})\, d^3x \int_{\mathbb{R}^3} \chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\Psi(\vec{x}',t)\, d^3x' = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\left(\hat{A}\chi_{n\mu}(\vec{x})\right) d^3x \int_{\mathbb{R}^3} \chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\Psi(\vec{x}',t)\, d^3x' = \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{A}\Psi(\vec{x},t)\right)^* \left\{ \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} \left[\int_{\mathbb{R}^3} \chi^*_{n\mu}(\vec{x}')\Psi(\vec{x}',t)\, d^3x' \right] \right\} d^3x,
\end{aligned}
\tag{7.24}
$$

de unde, prin utilizarea din nou a relaţiei (7.20) şi a caracterului autoadjunct al lui $\hat{A}$, deducem

$$
\begin{aligned}
<A> &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{A}\Psi(\vec{x},t)\right)^* \left[\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\mu=1}^{g(n)} c_{n\mu}(t)\chi_{n\mu}(\vec{x}) \right] d^3x = \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \left(\hat{A}\Psi(\vec{x},t)\right)^* \Psi(\vec{x},t)\, d^3x = \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\left(\hat{A}\Psi(\vec{x},t)\right) d^3x
\end{aligned}
\tag{7.25}
$$

adică obţinem în final, relaţia de definiţie a valorii medii a observabilei A la momentul t în starea cuantică $\Psi(\vec{x},t)$ a sistemului considerat :

$$
<A>(t) = (\Psi, \hat{A}\Psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\hat{A}\Psi(\vec{x},t)\, d^3x . \tag{7.26}
$$

După cum se observă, prima egalitate din (7.26) este principial valabilă în condiţii cu mult mai generale decât cele în care a fost dedusă a doua egalitate şi, de accea, ea este postulată în întreaga Mecanică Cuantică drept definiţie a valorii medii a oricărei observabile în orice stare $\Psi(t)$.

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B. VARIATIA IN TIMP A VALORII MEDII SI DERIVATA TOTALA IN RAPORT CU TIMPUL A UNEI OBSERVABILE

Fie A o mărime fizică ce caracterizează un sistem natural, nu neaparat uniparticulă, a cărui stare cuantică în orice moment t este descrisă de vectorul de stare $\Psi(t)\in E$ (spaţiul Hilbert abstract al stărilor sistemului), soluţie a Ecuaţiei de Evoluţie

(7.27) $\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$,

unde $\hat{H}$ este operatorul Hamilton asociat Hamiltonianului sistemului.

Dat fiind că în formalismul matematic al Mecanicii Cuantice, mărimea fizică A va fi reprezentată (totdeauna) de operatorul autoadjunct $\hat{A}$ asociat ei, convenim, lucru pe care în mod tacit l-am şi făcut de câteva ori până acum, să utilizăm denumirea de observabilă atât pentru A cât şi pentru operatorul $\hat{A}$ care îi corespunde. In baza acestei convenţii, valoarea medie a observabilei $\hat{A}$ în starea cuantică Ψ este general definită prin expresia

(7.28) $<\hat{A}>=(\Psi,\hat{A}\Psi)$.

Presupunând că observabila $\hat{A}$ are o dependenţă temporală explicită, pe care o evidenţiem prin notaţia $\hat{A}(t)$, valoarea medie a ei la un moment $t+\tau$ oarecare se reprezintă "detaliat" sub forma

(7.29) $<\hat{A}>(t+\tau)=\left(\Psi(t+\tau),\ \hat{A}(t+\tau)\Psi(t+\tau)\right)$,

care, pentru $|\tau|$ suficient de mic devine

(7.30)

$$<\hat{A}>(t+\tau)=$$

$$=\left(\Psi(t)+\tau\frac{\partial\Psi}{\partial t}+O(\tau^n;n\geq 2),\left[\hat{A}(t)+\tau\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+O(\tau^n;n\geq 2)\right]\left(\Psi(t)+\tau\frac{\partial\Psi}{\partial t}+O(\tau^n;n\geq 2)\right)\right),$$

adică (omiţând termenii în τ^n cu $n\geq 2$)

$$<\hat{A}>(t+\tau)=$$

(7.31)
$$=\left(\Psi(t)+\tau\frac{\partial\Psi}{\partial t},\hat{A}(t)\left(\Psi(t)+\tau\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)+\tau\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi(t)\right).$$

Având în vedere liniaritatea operatorului $\hat{A}$ şi proprietăţile produsului scalar, obţinem din (7.31) relaţia

$$<\hat{A}>(t+\tau)=$$

(7.32)
$$=\left(\Psi(t),\hat{A}(t)\Psi(t)\right)+\tau\left(\Psi(t),\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi(t)\right)+\tau^2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t},\hat{A}\Psi(t)\right)+$$
$$+\tau\left(\Psi(t),\hat{A}(t)\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)+\tau^2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t},\hat{A}(t)\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)+$$
$$+\tau^2\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t},\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi(t)\right),$$

care, prin omiterea termenilor în τ^2, capătă forma

$$<\hat{A}>(t+\tau)=<\hat{A}>(t)+$$

(7.33)
$$+\tau\left\{\left(\Psi(t),\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi(t)\right)+\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t},\hat{A}(t)\Psi(t)\right)+\left(\Psi(t),\hat{A}(t)\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\right\}.$$

Cum vectorul de stare Ψ este în orice moment soluţie a Ecuaţiei de Evoluţie (7.27), deci

(7.34) $$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi,$$

obţinem din (7.33), utilizând (7.34), următoarea expresie pentru diferenţa

valorilor medii ale observabilei $\hat{A}$ la momentele infinitezimal apropiate $t+\tau, t$

$$<\hat{A}>(t+\tau)-<\hat{A}>(t)=$$

(7.35)
$$=\tau\left\{\left(\Psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Psi\right)+\frac{i}{\hbar}[(\hat{H}\Psi,\hat{A}\Psi)-(\Psi,\hat{A}\hat{H}\Psi)]\right\},$$

în care, în membrul drept, pentru simplificarea notaţiilor, nu am mai specificat momentul t. Dat fiind că $\hat{H}$ este un operator autoadjunct, al doilea termen din dreapta se scrie

(7.36) $(\hat{H}\Psi,\hat{A}\Psi)=(\Psi,\hat{H}\hat{A}\Psi)$

şi definind derivata în raport cu timpul a valorii medii a observabilei A prin relaţia

(7.37) $$\frac{d}{dt}<\hat{A}>=\lim_{\tau\to 0}\{\tau^{-1}[<\hat{A}>(t+\tau)-<\hat{A}>(t)]\},$$

deducem pentru aceasta, luând în considerare relaţiile (7.36) şi (7.35), expresiile concrete

(7.38)

a) $$\frac{d}{dt}<\hat{A}>=\left(\Psi,\left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\right)\Psi\right)$$

b) $$\frac{d}{dt}<\hat{A}>=\left\langle\left(\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\right)\right\rangle, \text{ unde } [\hat{H},\hat{A}]=\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H},$$

care, împreună cu relaţia (7.28) de definiţie a valorii medii a observabilei A, joacă un rol fundamental, nu numai în interpretarea fizică a formalismului, dar şi în înseşi bazele Mecanicii Cuantice. Legea de derivare substanţială a observabilelor, pe care o vom deduce imediat şi care conduce, în particular, la forma ecuaţiilor Hamilton în Mecanica Cuantică, împreună cu Teoremele Ehrenfest, de care ne vom ocupa în următorul subparagraf, reprezintă două din cele mai importante (şi evidente) consecinţe ale expresiilor (7.38) de variaţie în timp a valorii medii a unei observabile.

Din punct de vedere axiomatic, bazându-ne pe forma operatorului din

membrul drept al relaţiilor (7.38), putem pur şi simplu defini derivata totală în raport cu timpul a operatorului $\hat{A}$ prin relaţia

$$(7.39)\quad \frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}].$$

Din punct de vedere constructivist (deductiv) este, sau cel puţin pare, mai natural să presupunem valabilitatea teoremei ergodice ca fiind generală şi atunci, operatorul de derivare totală în raport cu timpul va comuta cu operaţia de mediere (după orice stare cuantică a sistemului), adică

$$(7.40)\quad \frac{d}{dt}<\hat{A}>=\left\langle\frac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle,$$

ceea ce conduce, prin înlocuire în (7.38.b), la relaţia

$$(7.41)\quad \left\langle\frac{d\hat{A}}{dt}\right\rangle=\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\right\rangle,$$

din care rezultă imediat expresia (7.39) a derivatei substanţiale a observabilei $\hat{A}$. De altfel, după cum se poate remarca fără nici o dificultate, cele două puncte de vedere sunt complet echivalente prin intermediul legii de variaţie în timp a valorii medii, deoarece, utilizând definiţia (7.39) în expresia (7.38), obţinem în mod clar relaţia (7.40).

Inainte de a trece la studiul teoremelor Ehrenfest, ale căror demonstraţii sunt bazate integral pe relaţiile (7.38) şi (7.39), să mai observăm că din expresia derivatei substanţiale a unei observabile se desprind următoarele concluzii fundamentale:

(i) O observabilă independentă explicit de timp se conservă dacă şi numai dacă comută cu hamiltonianul. Aceasta este o modalitate specifică Mecanicii Cuantice de a exprima o lege de conservare.

(ii) Dat fiindcă operatorii fundamentali $\hat{x},\hat{p}$ nu depind explicit de timp, derivatele lor totale în raport cu timpul au expresiile

(7.42) a) $$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}]$$

b) $$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}]$$

care, prin comparare cu ecuaţiile canonice clasice, exprimate cu ajutorul parantezelor Poisson

(7.42') a) $$\frac{d\vec{x}}{dt} = \{H, \vec{x}\}$$

b) $$\frac{d\vec{p}}{dt} = \{H, \vec{p}\}$$, unde $$\{A, B\} = \sum_{a=1}^{f}\left[\frac{\partial A}{\partial p_a}\cdot\frac{\partial B}{\partial x^a} - \frac{\partial B}{\partial p_a}\cdot\frac{\partial A}{\partial x^a}\right],$$

şi aplicarea Principiului de Corespondenţă $\{\cdot,\cdot\} \to \frac{i}{\hbar}[\cdot,\cdot]$, reprezintă în fapt forma ecuaţiilor Hamilton în Mecanica Cuantică.

C. TEOREMELE LUI EHRENFEST

Conform Principiului Euristic (de continuitatea Cunoaşterii) orice teorie nouă într-un domeniu dat trebuie să conţină, într-o manieră univocă, vechea teorie din acel domeniu, deoarece aceasta, în anumite limite, era destul de bine verificată experimental. In cazul Relativităţii Restrânse de exemplu, aceasta se reduce la Mecanica Newtoniană în limita vitezelor neglijabile în raport cu viteza luminii şi a energiilor cinetice ale particulelor mult mai mici decât energiile lor de repaus. In fizica microcosmosului, sub forma în care era cunoscută înainte de apariţia Mecanicii Cuantice, legătura "vechii teorii a cuantelor" cu fizica necuantică era asigurată de Principiul lui Bohr, conform căruia "în limita numerelor cuantice mari, legile fizicii cuantice se reduc la legile clasice".

In raport cu "vechea teorie a cuantelor", formalismul funcţional, bazat

pe acţiunea observabilelor în spaţiul hilbertian al stărilor cuantice ale sistemului, oferă o cale cu mult mai generală de racordare a Mecanicii Cuantice la Fizica Clasică:

> *Legile cuantice, exprimate de derivatele substanţiale ale observabilelor, conduc prin mediere, după orice stare (cuantică) a sistemului, la legile de variaţie în timp a valorilor medii ale observabilelor, care coincid cu legile clasice.*

Cu alte cuvinte, într-o exprimare mai "filozofică":

> *Legile Mecanicii Cuantice se reduc la legile Fizicii Clasice pentru valorile medii ale observabilelor.*

Această afirmaţie este ilustrată de o serie de exemple concrete, care poartă numele de Teoremele lui Ehrenfest şi, în cele ce urmează, vom demonstra trei dintre acestea. Considerăm în acest scop cazul destul de general al unui sistem natural de N particule (neidentice), cu $f=3N$ grade de libertate de tip cartezian $\left\{x_\mu^i\right\}_{\mu=\overline{1,N}}^{i=\overline{1,3}}$, descris de hamiltonianul

$$(7.43)\quad H=\sum_{\mu=1}^{N}\left[\frac{1}{2m_\mu}|\vec{p}_\mu|^2+V_\mu(\vec{x}_\mu,t)\right]+\frac{1}{2}\sum_{(\mu\neq\nu)}W_{\mu\nu}(|\vec{x}_\mu-\vec{x}_\nu|),$$

unde $\sum_{(\mu\neq\nu)}$ reprezintă suma după toate valorile de la 1 la N ale indicilor diferiţi μ şi ν, iar $W_{\mu\nu}(|\vec{x}_\mu-\vec{x}_\nu|)=W_{\nu\mu}(|\vec{x}_\mu-\vec{x}_\nu|)$. Prin aplicarea Principiului Corespondenţei, obţinem din (7.43) operatorul Hamilton

$$(7.44)\quad \hat{H}=\sum_{\mu=1}^{N}\left[\frac{\delta^{ik}}{2m_\mu}\hat{p}_{\mu i}\hat{p}_{\mu k}+\hat{V}_\mu\left(x_\mu^i,t\right)\right]+\frac{1}{2}\sum_{(\mu\neq\nu)}\hat{W}_{\mu\nu}(X_{\mu\nu}),\ \text{cu}\ X_{\mu\nu}=|\vec{x}_\mu-\vec{x}_\nu|,$$

în care operatorii "potenţial" $\hat{V}_\mu$ şi $\hat{W}_{\mu\nu}$ acţionează multiplicativ, deci coincid cu V_μ şi $W_{\mu\nu}$, iar operatorii impuls au în reprezentarea de configuraţie expresia

(7.45) $\hat{p}_{\mu i}=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_\mu^i}$, $(\forall) i=\overline{1,3}$, $\mu=\overline{1,N}$.

Din (7.45) obţinem, după cum se poate verifica uşor, următoarea relaţie generală de comutare a observabilelor $\hat{p}_{\mu i}$ şi $\hat{x}_\nu^k$

(7.46) $\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{X}_\nu^k\right]=\frac{\hbar}{i}\delta_{\mu\nu}\delta_i^k$, $(\forall)$ $i,k=\overline{1,3}$; $\mu,\nu=\overline{1,N}$.

Tot cu ajutorul relaţiei (7.45), să calculăm comutatorii observabilei $\hat{p}_{\mu i}$ cu fiecare din observabilele $\hat{V}_\mu$ şi $\hat{W}_{\mu\nu}$. Pentru $\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{V}_\alpha\right]$ avem

$$\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{V}_\alpha\left(x_\alpha^k,t\right)\right]\psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu^i}\left(V_\alpha\psi\right)-V_\alpha\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_\mu^i}\ ,\ (\forall)\ \psi\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3),$$

adică

(7.47) $\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{V}_\alpha\right]=\frac{\hbar}{i}\delta_{\mu\alpha}\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\alpha^i}$, fără sumare după α.

In mod analog, dar puţin mai complicat, pentru $\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{W}_{\alpha\beta}\right]$ avem relaţia

$$\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{W}_{\alpha\beta}\right]=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial x_\mu^i},$$

în care explicităm derivata parţială din membrul drept

$$\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial x_\mu^i}=\left(\delta_{\mu\alpha}-\delta_{\mu\beta}\right)\frac{x_\alpha^i-x_\beta^i}{\left|\vec{x}_\alpha-\vec{x}_\beta\right|}\cdot\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial X_{\alpha\beta}};\ \text{(fără sumare după } \alpha \text{ şi } \beta\text{)},$$

şi ajungem astfel la relaţia de comutare

(7.48) $\left[\hat{p}_{\mu i},\hat{W}_{\alpha\beta}\right]=\frac{\hbar}{i}\left(\delta_{\mu\alpha}-\delta_{\mu\beta}\right)n_{\alpha\beta}^i\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial X_{\alpha\beta}}$; (fără sumare după α şi β),

unde tensorul $n_{\alpha\beta}^i=-n_{\beta\alpha}^i$ are expresia

(7.49) $n_{\alpha\beta}^i=\left(x_\alpha^i-x_\beta^i\right)\cdot X_{\alpha\beta}^{-1}$.

BUCUREŞTI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dat fiind că în cadrul acestui tratat nu ne-am ocupat deloc de teoria cuantică a observabilei moment cinetic (orbital sau/şi de spin), deoarece aceasta este cu mult prea importantă pentru a nu fi prezentată integral (într-o altă lucrare), în continuare vom defini numai observabila moment cinetic orbital şi vom calcula numai acele relaţii de comutare de care vom avea nevoie în demonstrarea celei de a treia teoreme a lui Ehrenfest. Astfel, după cum se cunoaşte din Mecanica Clasică, momentul cinetic orbital al unei particule (punctuale) este definit prin relaţia

(7.50) $\vec{L}=\vec{x}\times\vec{p}$,

unde $\vec{x}$ este vectorul de poziţie al particulei, iar $\vec{p}$ impulsul mecanic al acesteia. Cum mărimea fizică (7.50) este reprezentată deja în raport cu variabilele canonic conjugate $(\vec{x},\vec{p})$, putem aplica direct Principiul de Corespondenţă şi obţinem pentru operatorul autoadjunct asociat acesteia expresia

(7.51) $\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{x}}\times\hat{\vec{p}}$,

care, în reprezentare de configuraţie şi pe componente, se scrie

(7.52) $\hat{L}_i=\varepsilon_{ijk}x^j\hat{p}_k=\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk}x^j\frac{\partial}{\partial x^k}$.

Evident, pentru cea de a μ-a particulă a sistemului, operatorul moment cinetic orbital, componenta i, are expresia

(7.53) $\hat{L}_{\mu i}=\varepsilon_{ijk}x^j_\mu\hat{p}_{\mu k}=\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk}x^j_\mu\frac{\partial}{\partial x^k_\mu}$,

în care, desigur, în membrii din dreapta, nu se sumează după μ. Primul comutator important, pentru ceea ce ne interesează în acest subparagraf, este acela dintre operatorul energiei cinetice a sistemului

(7.54) $\hat{H}_0=\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{1}{2m_\alpha}\delta^{jm}\hat{p}_{\alpha j}\hat{p}_{\alpha m}$

şi observabila (7.53). Calculul acesteia este destul de simplu, deoarece observăm că relaţia

$$\left[\hat{H}_0,\hat{L}_{\mu i}\right]=\varepsilon_{ijk}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{1}{2m_\alpha}\left[\delta^{sm}\hat{p}_{\alpha s}\hat{p}_{\alpha m}\hat{x}_\mu^j\hat{p}_{\mu k}-\hat{x}_\mu^j\hat{p}_{\mu k}\hat{p}_{\alpha s}\hat{p}_{\alpha m}\delta^{sm}\right]$$

ar putea fi diferită de zero numai pentru $\alpha=\mu$ şi $s=m=j$, adică

$$\left[\hat{H}_0,\hat{L}_{\mu i}\right]=\frac{1}{2m_\mu}\varepsilon_{ijk}\hat{p}_{\mu k}\left[\hat{p}_{\mu j}\hat{p}_{\mu j},\hat{x}_\mu^j\right], \tag{7.55}$$

unde în scrierea sistemului din dreapta am avut în vedere că $j\neq k$ şi astfel $\hat{p}_{\mu k}$ este comutabil cu $\hat{x}_\mu^j$. Aplicând în (7.55) relaţia (6.42) pentru $n=2$, adică

$$\left[\hat{p}_{\mu j}\hat{p}_{\mu j},\hat{x}_\mu^j\right]=2\frac{\hbar}{i}\hat{p}_{\mu j}, \tag{7.56}$$

obţinem pentru comutatorul căutat

$$\left[\hat{H}_0,\hat{L}_{\mu i}\right]=\frac{-i\hbar}{m_\mu}\varepsilon_{ijk}\hat{p}_{\mu j}\hat{p}_{\mu k}\equiv 0, \tag{7.57}$$

deoarece tensor-operatorul $\hat{p}_{\mu j}\hat{p}_{\mu k}$ este simetric în indicii j şi k. Următorii doi comutatori de interes, în care participă observabila $\hat{L}_{\mu i}$, sunt $\left[\hat{V}_\alpha,\hat{L}_{\mu i}\right]$ şi $\left[\hat{W}_{\alpha\beta},\hat{L}_{\mu i}\right]$. Pentru primul dintre ei avem

$$\begin{aligned}\left[\hat{V}_\alpha,\hat{L}_{\mu i}\right]&=\varepsilon_{ijk}\left(\hat{V}_\alpha\hat{x}_\mu^j\hat{p}_{\mu k}-\hat{x}_\mu^j\hat{p}_{\mu k}V_\alpha\right)=\\&=\varepsilon_{ijk}\hat{x}_\mu^j\left[\hat{V}_\alpha,\hat{p}_{\mu k}\right],\end{aligned} \tag{7.58}$$

de unde rezultă, aplicând relaţia (7.47),

$$\left[\hat{V}_\alpha,\hat{L}_{\mu i}\right]=-\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk}\delta_{\mu\alpha}x_\mu^j\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\alpha^k}. \tag{7.59}$$

Pentru al doilea, obţinem o primă formă exact de tipul (7.58), adică

$$\left[\hat{W}_{\alpha\beta},\hat{L}_{\mu i}\right]=\varepsilon_{ijk}\hat{x}_\mu^j\left[\hat{W}_{\alpha\beta},\hat{p}_{\mu k}\right]$$

şi utilizând (7.48), găsim relaţia

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(7.60) $$\left[\hat{W}_{\alpha\beta},\hat{L}_{\mu i}\right]=-\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk}\left(\delta_{\mu\alpha}-\delta_{\mu\beta}\right)x_{\mu}^{j}n_{\alpha\beta}^{k}\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial x_{\alpha\beta}},$$

din care deducem, având în vedere (7.49) şi faptul că

$$\varepsilon_{ijk}\delta_{\mu\alpha}x_{\mu}^{j}x_{\alpha}^{k}=\varepsilon_{ijk}\delta_{\mu\beta}x_{\mu}^{j}x_{\beta}^{k}\equiv 0,$$

expresia

(7.60') $$\left[\hat{W}_{\alpha\beta},\hat{L}_{\mu i}\right]=\frac{\hbar}{i}\varepsilon_{ijk}\left(\delta_{\mu\alpha}x_{\mu}^{j}x_{\beta}^{k}+\delta_{\mu\beta}x_{\mu}^{j}x_{\alpha}^{k}\right)X_{\alpha\beta}^{-1}\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial X_{\alpha\beta}},$$

al cărei membru drept este diferit de zero atât pentru $\alpha=\mu$ cât şi pentru $\beta=\mu$ (având de fiecare dată, bineînţeles, $\alpha\neq\beta$) dacă nu sumăm după indicii μ,α,β. După cum vom vedea, această observaţie va juca un rol important în cea de a treia Teoremă a lui Ehrenfest.

Suntem acum în măsură să demonstrăm cu uşurinţă următoarele Teoreme ale lui Ehrenfest:

Teorema I : Definiţia impulsului mecanic

Din (7.39), pentru $\hat{A}=\hat{x}_{\mu}^{i}$ şi $\hat{H}$ dat de relaţia (7.44), avem

(7.61) $$\frac{d\hat{x}_{\mu}^{i}}{dt}=\frac{i}{\hbar}\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{1}{2m_{\alpha}}\left[\delta^{jm}\hat{p}_{\alpha j}\hat{p}_{\alpha m},\hat{x}_{\mu}^{i}\right],$$

unde am ţinut seama de faptul că operatorii $\hat{V}_{\alpha}$ şi $\hat{W}_{\alpha\beta}$ comută cu $\hat{x}_{\mu}^{i}$. In baza relaţiilor (7.46) şi (6.42), pentru $n=2$, obţinem pentru (7.61) expresia

$$\frac{d\hat{x}_{\mu}^{i}}{dt}=\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m_{\mu}}\left[\hat{p}_{\mu i}\hat{p}_{\mu i},\hat{x}_{\mu}^{i}\right]=\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m_{\mu}}2\frac{\hbar}{i}\hat{p}_{\mu i},$$

adică, în transcrierea vectorială, avem definiţia operatorului viteză

(7.62) $$\frac{d\hat{x}_{\mu}}{dt}=\frac{1}{m_{\mu}}\hat{p}_{\mu},$$

a cărui valoare medie, într-o stare Ψ, a sistemului satisface relaţia clasică de

definiţie a impulsului mecanic al particulei μ :

(7.63) $\langle \hat{p}_\mu \rangle = m_\mu \frac{d}{dt} \langle \hat{x}_\mu \rangle$;

(am avut în vedere (7.40)).

Evident, pentru valoarea medie a observabilei impuls total al sistemului, avem

$$<\hat{P}> = \left\langle \sum_{\mu=1}^{N} \hat{p} \right\rangle = \sum_{\mu=1}^{N} \langle \hat{p}_\mu \rangle = \sum_{\mu=1}^{N} m_\mu \left\langle \frac{d\hat{X}_\mu}{dt} \right\rangle,$$

adică

(7.64)

a) $$\langle \hat{P} \rangle = \sum_{\mu=1}^{N} m_\mu \frac{d}{dt} \langle \hat{x}_\mu \rangle$$

b) $$\langle \hat{P} \rangle = \frac{d}{dt} \left[\sum_{\mu=1}^{N} m_\mu \langle \hat{x}_\mu \rangle \right].$$

Expresia (7.64.b) scoate în evidenţă concordanţa deplină cu definiţia clasică

(7.65) $\vec{P} = \frac{d}{dt}(M\vec{X})$

a impulsului total, formulată cu ajutorul masei totale a sistemului

(7.66) $M = \sum_{\mu=1}^{N} m_\mu$

şi a vectorului de poziţie al centrului da masă al acestuia

(7.67) $\vec{X} = M^{-1} \sum_{\mu=1}^{N} m_\mu \vec{x}_\mu$.

Teorema II : Principiul al II-lea al Mecanicii

Pentru $\hat{A} = \hat{p}_{\mu i}$ şi $\hat{H}$ de forma (7.44), obţinem din (7.39) relaţia

(7.68) $$\frac{d\hat{p}_{\mu i}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{N} \left[V_\alpha, \hat{p}_{\mu i} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \left[W_{\alpha\beta}, \hat{p}_{\mu i} \right] \right\}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(deoarece $\left[\hat{H}_0,\hat{p}_{\mu i}\right]\equiv 0$, după cum se poate verifica foarte uşor) şi care devine, utilizând (7.47) şi (7.48),

$$(7.69)\quad \frac{d\hat{p}_{\mu i}}{dt}=-\left\{\sum_{\alpha=1}^{N}\delta_{\mu\alpha}\frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\alpha^i}+\sum_{(\alpha\neq\beta)}\frac{\delta_{\mu\alpha}-\delta_{\mu\beta}}{2}n_{\alpha\beta}^i\frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial X_{\alpha\beta}}\right\},$$

ceea ce înseamnă, calculând sumele care intervin,

$$(7.70)\quad \frac{d\hat{p}_{\mu i}}{dt}=-\frac{\partial V_\mu}{\partial x_\mu^i}-\sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N}n_{\mu\alpha}^i\frac{\partial W_{\mu\alpha}}{\partial X_{\mu\alpha}}.$$

Pentru media, într-o stare cuantică Ψ, a relaţiei (7.70) obţinem în transcriere vectorială expresia

$$(7.71)\quad \left\langle\frac{d}{dt}\hat{\vec{p}}_\mu\right\rangle=\left\{\left\langle-\nabla_\mu V_\mu\right\rangle-\left\langle\sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N}\frac{\partial W_{\mu\alpha}}{\partial X_{\mu\alpha}}\vec{n}_{\mu\alpha}\right\rangle\right\},$$

pe care, introducând notaţiile

$$(7.72)\quad \vec{F}_{(e)\mu}=-\nabla_\mu V_\mu \text{ şi } \vec{F}_{(i)\mu\alpha}=-\frac{\partial W_{\mu\alpha}}{\partial X_{\mu\alpha}};\ \text{cu } \vec{F}_{(i)\mu\alpha}=-\vec{F}_{(i)\alpha\mu}$$

pentru forţa exterioară asupra particulei μ şi pentru forţa internă de interacţiune reciprocă dintre particulele μ şi α, o aducem imediat la forma-i binecunoscută din Mecanica (clasică) a sistemelor de Puncte Materiale

$$(7.73)\quad \frac{d}{dt}\left\langle\hat{\vec{p}}_\mu\right\rangle=\left\langle\vec{F}_{(e)\mu}\right\rangle+\sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N}\left\langle\vec{F}_{(i)\mu\alpha}\right\rangle.$$

Prin sumare în relaţia (7.70), după μ de la 1 la N, obţinem relaţia

$$(7.74)\quad \sum_{\mu=1}^{N}\frac{d}{dt}\left\langle\hat{\vec{p}}_\mu\right\rangle=\frac{d}{dt}\left(\sum_{\mu=1}^{N}\left\langle\hat{\vec{p}}_\mu\right\rangle\right)=\left\langle\sum_{\mu=1}^{N}\vec{F}_{(e)\mu}\right\rangle+\left\langle\sum_{(\alpha\neq\mu)}\vec{F}_{(i)\mu\alpha}\right\rangle.$$

După cum se observă imediat din (7.73), dat fiind că $\vec{F}_{(i)\mu\alpha}=-\vec{F}_{(i)\alpha\mu}$, avem

(7.75) $$\sum_{(\alpha\neq\mu)} \vec{F}_{(i)\mu\alpha} \equiv 0$$

şi astfel, introducând notaţia

(7.76) $$\vec{F}_{(e)} = \sum_{\mu=1}^{N} \vec{F}_{(e)\mu}$$

pentru observabila forţă exterioară totală şi având în vedere definiţia

(7.77) $$\hat{P} = \sum_{\mu=1}^{N} \hat{p}_{\mu}$$

a observabilei impuls total al sistemului, deducem din relaţia (7.74) legea clasică de variaţie în timp a impulsului (centrului de masă al) sistemului

(7.78) $$\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = \left\langle \vec{F}_{(e)} \right\rangle .$$

Teorema III : Legea Fundamentală a Dinamicii pentru Momentul Cinetic

In fine, pentru hamiltonianul (7.44) şi $\hat{A} = \hat{L}_{\mu i}$ în relaţia (7.39), avem

(7.79) $$\frac{d\hat{L}_{\mu i}}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\{\sum_{\alpha=1}^{N}\left[V_{\alpha}, \hat{L}_{\mu i}\right] + \frac{1}{2}\sum_{(\alpha\neq\beta)}\left[W_{\alpha\beta}, \hat{L}_{\mu i}\right]\right\},$$

unde am luat în considerare comutarea observabilei $\hat{L}_{\mu i}$ cu hamiltonianul $\hat{H}_0$ (dat de (7.54)) al sistemului complet neinteractiv (adică am utilizat relaţia (7.57)). Prin estimarea termenilor din dreapta, utilizând (7.60), (7.59), obţinem pentru expresia (7.79) forma concretă

(7.80) $$\frac{d\hat{L}_{\mu i}}{dt} = -\varepsilon_{ijk} x_{\mu}^{j} \frac{\partial V_{\mu}}{\partial x_{\mu}^{k}} - \sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N} \varepsilon_{ijk} x_{\mu}^{j} n_{\mu\alpha}^{k} \frac{\partial W_{\mu\alpha}}{\partial X_{\mu\alpha}},$$

pe care o "transformăm" prin recunoaşterea (în membrul drept) a observabilelor forţă, definite prin (7.72), în relaţia operatorial-vectorială

(7.81) $$\frac{d\hat{\vec{L}}_{\mu}}{dt} = \hat{\vec{x}}_{\mu} \times \hat{\vec{F}}_{(e)\mu} + \sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N} \hat{\vec{x}}_{\mu} \times \hat{\vec{F}}_{(i)\mu\alpha},$$

BCU ALEXANDRU IOAN CUZA UNIVERSITY LIBRARY

care sugerează definirea observabilelor moment al forţei exterioare şi respectiv, moment al forţei interioare, prin relaţiile

$$\hat{\mathbf{M}}_{(e)\mu} = \hat{x}_\mu \times \hat{F}_{(e)\mu} \; ;$$

(7.82)

$$\hat{\mathbf{M}}_{(i)\mu} = \vec{x}_\mu \times \left\{ \sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N} \vec{F}_{(i)\mu\alpha} \right\}.$$

Inlocuind (7.82) în (7.81) şi luând valoarea medie într-o stare cuantică oarecare, obţinem legea clasică de variaţie în timp a momentului cinetic orbital al particulei μ, adică

$$(7.83) \quad \frac{d}{dt}\left\langle \hat{L}_\mu \right\rangle = \left\langle \hat{\mathbf{M}}_{(e)\mu} \right\rangle + \left\langle \hat{\mathbf{M}}_{(i)\mu} \right\rangle.$$

Procedând ca în cazul relaţiei (7.73), adică sumând după μ de la 1 la N şi definind (simplu) observabila moment cinetic orbital al întregului sistem

$$(7.84) \quad \hat{L} = \sum_{\mu=1}^{N} \hat{L}_\mu,$$

obţinem, din (7.83), următoarea expresie

$$(7.85) \quad \frac{d}{dt}\langle \hat{L} \rangle = \sum_{\mu=1}^{N} \left\langle \hat{\mathbf{M}}_{(e)\mu} \right\rangle + \sum_{\mu=1}^{N} \left\langle \hat{\mathbf{M}}_{(i)\mu} \right\rangle.$$

In baza observaţiei efectuate după obţinerea relaţiei (7.60'), avem

$$\sum_{\mu=1}^{N} \hat{\mathbf{M}}_{(i)\mu} = \sum_{\mu=1}^{N} \sum_{\alpha=1,\alpha\neq\mu}^{N} \vec{x}_\mu \times \vec{F}_{(i)\mu\alpha} = \sum_{(\mu\neq\alpha)} \vec{x}_\mu \times \left[-\vec{n}_{\mu\alpha} \frac{\partial W_{\mu\alpha}}{\partial X_{\mu\alpha}} \right],$$

adică

$$(7.86) \quad \sum_{\mu=1}^{N} \hat{\mathbf{M}}_{(i)\mu} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{N} \sum_{(\alpha\neq\beta)} \varepsilon_{ijk} \left(\delta_{\mu\alpha} x_\mu^j x_\beta^k + \delta_{\mu\beta} x_\mu^j x_\alpha^k \right) X_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\partial W_{\alpha\beta}}{\partial X_{\alpha\beta}} \equiv 0$$

şi astfel, definind prin relaţia aproape evidentă

$$(7.87) \quad \hat{\mathbf{M}}_{(e)} = \sum_{\mu=1}^{N} \hat{\mathbf{M}}_{(e)\mu},$$

observabila moment total al forţelor exterioare, putem remarca, cum ecuaţia (7.85) va exprima în mod clar chiar legea clasică de variaţie a momentului

cinetic total al sistemului

(7.88) $\frac{d}{dt}<\hat{L}> = \left\langle \hat{\mathbf{M}}_{(e)} \right\rangle$.

V.8. Principiul de Incertitudine, un *cenzor* în microcosmos

Ca şi în cazul unora dintre aspectele deosebite din cadrul Teoriei Relativităţii Generale, cum ar fi găurile negre (black holes), galeriile de cârtiţă (wormholes), curbele temporale închise şi problema cenzorului cosmic, Principiul de Incertitudine, împreună cu problemele legate de interpretările sale viabile, se bucură de o largă popularitate, fiind amplu discutat atât de fizicieni cât şi de filozofi. In acest paragraf, din dorinţa de a nu ne implica în polemici aprinse, care ar depăşi cu mult, sub aspect fizic şi mai ales filozofic, cadrul lucrării de faţă, ne vom situa, în prezentarea şi interpretarea Principiului de Incertitudine şi în analiza consecinţelor sale, pe poziţiile aşa-zis ortodoxe ale Mecanicii Cuantice.

Să începem prin a vedea în ce măsură, în Mecanica Cuantică, putem vorbi de certitudine. Un prim exemplu, practic evident, ne este oferit de condiţia de normare

$$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t)\,d^3x = 1\,,$$

care asigură interpretarea probabilistă a funcţiei de undă $\Psi(\vec{x},t): \mathbb{R}^3 x \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ asociată unei microparticule. Dat fiind că în Mecanica Cuantică sunt studiate procesele fizice în care numărul de microparticule şi natura acestora nu sunt variabile în timp, rezultă că prezenţa fiecăreia dintre particulele sistemului undeva în întregul spaţiu fizic $\mathbb{R}^3$, la un moment oarecare $t>t_0=0\in\mathbb{R}_+$, este o certitudine, dacă particula a fost prezentă undeva în $\mathbb{R}^3$ la momentul iniţial $t_0=0$.

Ca un al doilea exemplu, de asemenea evident dacă ne amintim o serie

de aspecte discutate în subparagraful A al paragrafului anterior, este cert că o observabilă $\hat{A}$, având un set total de funcţii proprii corespunzătoare spectrului discret de valori proprii $\Sigma(\hat{A})=\{\alpha_n\}_{n=1,2,...}$ va prezenta, în măsurătorile efectuate asupra ei (la nivel microscopic), numai valori aparţinând spectrului $\Sigma(\hat{A})$ al ei.

In fine, al treilea exemplu, mai puţin banal, se referă la un microsistem conservativ caracterizat de hamiltonianul $\hat{H}$, cu $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$, şi de o observabilă $\hat{A}$, de asemenea independentă explicit de timp, care comută cu hamiltonianul sistemului. Dat fiind că observabilele $\hat{A}$ şi $\hat{H}$ comută, rezultă că ele vor avea un set complet de funcţii proprii comune $\{\psi_{ma}\}$, adică

(8.1) $\hat{H}\psi_{ma}=E_m\psi_{ma}$ şi $\hat{A}\psi_{ma}=\alpha_a\psi_{ma}$,

unde $(\psi_{m'a'},\psi_{ma})=\delta_{m'm}\delta_{a'a}$.

Din (8.1) şi Ecuaţia de Evoluţie

$$\hat{H}\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

obţinem pentru funcţia de stare a sistemului, expresia generală

(8.2) $$\Psi=\sum_{m,a}c_{ma}\psi_{ma}e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t},$$

în care

$$\|\Psi\|^2=\sum_{m',a'}\sum_{m,a}c^*_{m'a'}c_{ma}\left(\psi_{m'a'},\psi_{ma}\right)e^{\frac{i}{\hbar}(E_{m'}-E_m)t}=$$

$$=\sum_{m',a'}\sum_{ma}c^*_{m'a'}c_{ma}\delta_{m'm}\delta_{a'a}e^{\frac{i}{\hbar}(E'_m-E_m)t}=1,$$

adică

(8.3) $$\sum_{m,a}|c_{ma}|^2=1$$

şi deci $|c_{ma}|^2$ reprezintă probabilitatea ca sistemul, fiind în starea Ψ, la o testare a observabilelor H şi A, să obţinem chiar valorile E_m şi α_a. Presupunând că am efectuat această testare la momentul iniţial $t_0=0$ şi că am obţinut valorile E_n şi α_c, rezultă că la momentul imediat ulterior, t_0+0_+, am "lăsat" sistemul în starea ψ_{nc} şi deci, la orice moment $t\geq t_0+0_+$ starea sistemului va fi descrisă de

(8.4) $$\Psi(t\geq 0_+)=\psi_{nc}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right].$$

Cum $c_{ma}\equiv 0$ pentru orice $m\neq n$ şi orice $a\neq c$, este o certitudine faptul că la orice măsurători ulterioare efectuate asupra observabilelor H şi A, vom obţine E_n şi α_c. Având în vedere că $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}$ şi $[\hat{H},\hat{H}]=0=[\hat{H},\hat{A}]$, rezultă din (7.39) că cele două observabile se conservă, adică

(8.5) $$\frac{d\hat{H}}{dt}=0\ ;\ \frac{d\hat{A}}{dt}=0$$

şi putem remarca astfel cum rezultatele (8.1)-(8.4), nu numai că sunt în concordanţă cu legile de conservare (8.5), dar şi explicitează, la nivel microscopic, semnificaţia fizică a lor.

La un mod foarte general, aceste trei exemple le-am dat mai mult pentru nefizicienii care cochetând cu Principiul de Incertitudine şi extrapolându-l într-o manieră total imprudentă, ajung la concluzia că Mecanica Cuantică "trebuie schimbată", ea nefiind o disciplină pozitivistă, de moment ce în microcosmos nu există certitudine, iar hazardul, având putere de guvernare completă, conduce sine qua non la nedeterminare.

La modul concret, pe cititorii care încep acum studiul Mecanicii Cuantice, îi rugăm să fie atenţi la al treilea exemplu, în care, comutarea observabilei A cu hamiltonianul sistemului face posibilă determinarea

simultană, principial exactă, a valorilor E_n şi α_c ale observabilelor H şi A, la orice moment $t>t_0=0$.

Inainte de a trece la deducerea formei generale a relaţiilor de imprecizie, care exprimă matematic esenţa Principiului de Incertitudine, să analizăm pe o cale asemănătoare, dar nu identică, cu cea urmată de exemplul trei, ce se întâmplă în cazul în care observabila $\hat{A}$, având un set complet de funcţii proprii ortogonale $\{\varphi_a\}$, corespunzătoare spectruluui degenerat de valori proprii $\Sigma(\hat{A})=\{\alpha_a\}$ nu mai comută cu hamiltonianul conservativ $\hat{H}$, cu setul complet (ortonormal) de funcţii şi valori proprii $\{\psi_n, E_n\}$, al sistemului considerat. Deoarece $[\hat{H},\hat{A}]\neq 0$, rezultă că cei doi operatori nu pot avea nici un vector propriu comun, adică $\varphi_a\neq\psi_n$ $(\forall)a,n\in\mathbb{N}$ şi deci, testarea simultană, la momentul iniţial $t=0$, a observabilelor H şi A este practic imposibilă. Presupunând prin absurd că acest lucru ar fi posibil şi că am obţine, de exemplu, principial exact, valorile E_n şi α_a, atunci ar însemna că în urma măsurătorii, la momentul $t=0_+$, am lăsat sistemul în starea $\psi_n=\varphi_\alpha$, care însă nu există, dat fiind că $(\forall)\psi_n\neq\varphi_\alpha$ $(\forall)n,a\in\mathbb{N}$. Să investigăm puţin mai în detaliu "mersul evenimentelor" în cazul efectuării unor măsurători succesive asupra observabilelor H şi A. Cum atât $\{\psi_n\}$ cât şi $\{\varphi_a\}$ formează o bază ortonormală în spaţiul Hilbert E al stărilor sistemului, între elementele celor două baze vom avea relaţiile de legătură

a) $\psi_n=\sum_a s_{an}\varphi_a$, cu $s_{an}=(\varphi_a,\psi_n)$ şi $\begin{cases}\sum_a s_{an'}s^*_{an}=\delta_{n'n}\\ \sum_n s_{a'n}s^*_{an}=\delta_{a'a}\end{cases}$

(8.6)

b) $\varphi_a=\sum_n s^*_{an}\psi_n$, cu $s_{an}=(\varphi_a,\psi_n)$ şi $\begin{cases}\sum_a s_{an'}s^*_{an}=\delta_{n'n}\\ \sum_n s_{a'n}s^*_{an}=\delta_{a'a}\end{cases}$

iar vectorul de stare Ψ, soluţie a Ecuaţiei de Evoluţie, va avea expresia generală

(8.7.a) $\Psi=\sum_n c_n\psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$,

adică

(8.7.b) $\Psi=\sum_{n,a} c_n s_{an}\varphi_a e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$,

în care evident, coeficienţii $c_n\in\mathbb{C}$ satisfac condiţia de normare (8.3):

$$\sum_n |c_n|^2=1.$$

Presupunând că la $t=0$ efectuăm o testare a observabilei H şi găsim, de exemplu, valoarea E_n, atunci, în orice moment $t\geq 0_+$, sistemul va fi în starea

(8.8.a) $\Psi_n(t\geq 0_+)=\psi_n\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right]$,

adică

(8.8.b) $\Psi_n(t\geq 0_+)=\sum_a s_{an}\varphi_a\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right]$.

Exprimarea sub forma (8.8.a) a stării Ψ_n ne spune că la orice testare

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ulterioară, tot a observabilei H, vom obţine pentru aceasta, cu certitudine, tot valoarea E_n. In schimb, în ce priveşte observabila A, reprezentarea lui Ψ_n sub forma (8.8.b) ne spune că la orice $t \geq 0_+$, la o testare a lui A (în starea Ψ_n), avem probabilitatea $|s_{an}|^2 \in [0,1)$ de a găsi valoarea α_a. Cu alte cuvinte, deoarece $[\hat{H},\hat{A}] \neq 0$ imediat după testarea observabilei H şi aducerea sistemului în starea (8.8), suntem în imposibilitatea de a mai putea prevedea, în mod cert, ce valoare vom obţine pentru A, la o testare a acesteia la orice moment (ulterior) $t>0$. In continuare, să păstrăm starea Ψ_n până la momentul $t=t_1$, când efectuăm o testare a observabilei A şi obţinem, de exemplu, valoarea α_c. Prin "colapsare", imediat după efectuarea măsurătorii, starea sistemului devine φ_c, astfel încât, din

$$(8.9) \qquad \varphi_c = \sum_m c_m \psi_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t_1},$$

obţinem

$$(8.10) \qquad (\psi_n, \varphi_c) = s_{cn}^* = \sum_m c_m \delta_{nm} e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t_1} = c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t_1}, \quad (\forall)\ n \in \mathbb{N},$$

adică

$$(8.11) \qquad c_n = s_{cn}^* e^{\frac{i}{\hbar}E_n t_1}, \quad (\forall)\ n \in \mathbb{N}$$

şi deci starea cuantică a sistemului, la orice moment $t \geq t_1$, va fi descrisă de funcţia de undă

$$(8.12.a) \qquad \Psi(t \geq t_1) = \sum_n s_{cn}^* \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n (t-t_1)},$$

adică

(8.12.b) $$\Psi(t\geq t_1)=\sum_{n,a} s^*_{cn}s_{an}\varphi_a e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_1)}.$$

Cele două expresii (8.12) ne conduc la următoarele concluzii deosebit de importante:

(i) După testarea la $t=t_1$ a observabilei A şi obţinerea valorii α_c, starea $\Psi(t\geq t_1)$ încetează de a mai fi o stare proprie a observabilei H şi astfel $|s_{cn}|^2$, din (8.12.a), va reprezenta probabilitatea de realizare a valorii E_n la o testare a lui H la orice $t\geq t_1$ în starea $\Psi(t\geq t_1)$. Deci, după testarea lui A dispare inclusiv posibilitatea de a mai spune cu certitudine ce valoare vom obţine la o testare a observabilei H.

(ii) Din (8.12.b) rezultă că la orice $t>t_1$ (după testarea lui A) starea $\Psi(t>t_1)$ nu mai este nici (măcar) stare proprie a observabilei A. Cum

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0 \text{ dar } [\hat{H},\hat{A}]\neq 0, \text{ avem}$$

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\neq 0,$$

ceea ce revine concret, inspectând relaţia (8.12.b), la faptul că

(8.13) $$\wp_a(t>t_1)=\sum_{n',n} s^*_{an'}s_{cm'}s^*_{cn}s_{am}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_{n'}-E_n)(t-t_1)\right]$$

exprimă probabilitatea, variabilă în timp, de a obţine la momentul $t>t_1$, în starea $\Psi(t>t_1)$, la o testare a observabilei A, valoarea α_a.

Rezumând, putem spune că, dacă cele două observabile H şi A nu comută, atunci determinarea lor simultană, cu precizie principial absolută, este imposibilă, iar în cazul efectuării unor determinări succesive, întâi a lui H şi

apoi a lui A, după stabilirea valorii lui A nu mai avem nici o certitudine asupra valorilor care se vor realiza în testările ulterioare ale celor două observabile.

După aceste elemente pregătitoare, prin care am urmărit să evidenţiem cum se reflectă, la nivelul stărilor microsistemului efectele măsurătorilor efectuate asupra a două observabile, dintre care una este hamiltonianul sistemului, putem trece la stabilirea relaţiilor de imprecizie în cazul mai general a două observabile oarecare care nu comută.

A. FORMA GENERALA A RELATIILOR DE IMPRECIZIE

Să considerăm un microsistem caracterizat într-o manieră oarecare de două observabile A,B, descrise în formalismul Mecanicii Cuantice prin operatorii autoadjuncţi $\hat{A},\hat{B}$, despre care presupunem că au proprietatea

(8.14) $[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C}$, *unde* $i=\sqrt{-1}$, *iar* $\hat{C}\neq 0$.

Din (8.14), prin conjugare hermitică, obţinem

$$[\hat{A},\hat{B}]^{+}=(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}-\hat{A}^{+}\hat{B}^{+}=\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B}=[\hat{B},\hat{A}]=-i\hat{C}=-i\hat{C}^{+},$$

adică operatorul $\hat{C}$ este de asemenea autoadjunct, $\hat{C}^{+}\equiv\hat{C}$ şi deci $<\hat{C}>\in\mathbb{R}$, în orice stare cuantică a sistemului.

După cum se cunoaşte din statistica clasică, la efectuarea unui număr de N determinări ale unei mărimi fizice M, în care se obţin valorile $\{M_i\}_{i=\overline{1,N}}$, eroarea medie pătratică apărută în estimarea mărimii M, este definită prin relaţia

(8.15.a) $$(\Delta M)^2=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(M_i-\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}M_k\right)^2,$$

adică

8.15.b) $$(\Delta M)^2=<(M-<M>)^2>.$$

In limbajul curent, pentru prescurtarea exprimării, ΔM este denumită abaterea standard a mărimii M.

Relaţia (8.15.b) împreună cu aspectele discutate la definirea în Mecanica Cuantică a valorii medii (7.28) a unei observabile, ne permit să introducem direct, prin relaţiile:

$$\text{a)} \quad \Delta A = [<(\hat{A} - <\hat{A}>)^2>]^{1/2}$$

(8.16)

$$\text{b)} \quad \Delta B = [<(\hat{B} - <\hat{B}>)^2>]^{1/2},$$

abaterile standard ale observabilelor A, B în orice stare cuantică Ψ a microsistemului considerat.

Introducând operatorii autoadjuncţi

(8.17) $\hat{F} = \hat{A} - <\hat{A}>$ şi $\hat{G} = \hat{B} - <\hat{B}>$,

care au, în mod evident, proprietăţile:

$$\text{a)} \quad [\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{C}$$

$$\text{b)} \quad <\hat{F}> = <\hat{G}> = 0$$

(8.18)

$$\text{c)} \quad \Delta F = [<\hat{F}^2>]^{1/2} = \Delta A$$

$$\text{d)} \quad \Delta G = [<\hat{G}^2>]^{1/2} = \Delta B,$$

obţinem, având în vedere axioma de nenegativitate a normei, că pentru orice $\lambda \in \mathbb{R}$ şi orice $\Psi \in E$, este valabilă inegalitatea

(8.19) $\|(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi\| \geq 0$,

din care, prin ridicare la pătrat, rezultă

$$\|(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi\|^2 = ((\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi, (\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi) =$$

$$(\Psi, (\hat{F} - i\lambda\hat{G})^+(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi) = (\Psi, (\hat{F} + i\lambda\hat{G})(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\Psi) \geq 0$$

adică, utilizând (7.28),

(8.20) $<(\hat{F} + i\lambda\hat{G})(\hat{F} - i\lambda\hat{G})> \geq 0$, $(\forall)\ \lambda \in \mathbb{R}$,

în orice stare Ψ a microsistemului. Sub aspect matematic, inegalitatea (8.20)

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

este esenţială în deducerea relaţiei de imprecizie satisfăcută de abaterile standard ΔA şi ΔB.

In adevăr, avem

$$(8.21)\qquad \begin{aligned} &<(\hat{F}+i\lambda\hat{G})(\hat{F}-i\lambda\hat{G})>=<\hat{F}^2-i\lambda(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})+\lambda^2\hat{G}^2>= \\ &=<\hat{G}^2>\lambda^2-i<[\hat{F},\hat{G}]>\lambda+<\hat{F}^2>\geq 0\ ,\ (\forall)\ \lambda\in\mathbb{R}, \end{aligned}$$

adică, prin aplicarea proprietăţilor (8.18), obţinem

$$(8.22)\qquad (\Delta B)^2\lambda^2+<\hat{C}>\lambda+(\Delta A)^2\geq 0\ ,\ (\forall)\ \lambda\in\mathbb{R}.$$

In cazurile particulare când Ψ ar fi o stare proprie a lui B, sau a lui A, avem

$$(8.23)\qquad \text{a)}\quad (\Delta B)^2\equiv 0$$

$$\text{b)}\quad <\hat{C}>=-i\{(\Psi,\hat{A}\hat{B}\Psi)-(\Psi,\hat{B}\hat{A}\Psi)\}=-i\{\beta<\hat{A}>-\beta<\hat{A}>\}\equiv 0,$$

adică (8.22) ia forma particulară

$$(8.24)\qquad (\Delta A)^2\geq 0$$

şi respectiv, pentru Ψ stare proprie a lui A,

$$(8.25)\qquad \text{a)}\quad (\Delta A)^2\equiv 0$$

$$\text{b)}\quad <\hat{C}>=-i\{\alpha<\hat{B}>-\alpha<\hat{B}>\}\equiv 0$$

adică (8.22) devine

$$(8.26)\qquad (\Delta B)^2\cdot\lambda^2\geq 0,$$

ceea ce înseamnă că, în aceste cazuri particulare, inegalitatea (8.22) este "automat" satisfăcută. Prin urmare, putem considera direct cazul general al unei stări cuantice oarecare, când $<\hat{C}>\neq 0$, $\Delta A>0$ şi $\Delta B>0$, şi atunci, după cum ştim din algebra elementară, condiţia ca inegalitatea (8.22) să fie îndeplinită oricare ar fi $\lambda\in\mathbb{R}$ este ca discriminantul membrului stâng să fie nepozitiv, adică

$$(8.27)\qquad |<C>|^2-4(\Delta A)^2\cdot(\Delta B)^2\leq 0$$

de unde obţinem imediat forma generală a relaţiilor de imprecizie

(8.28) $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle \hat{C} \rangle|$,

care constituie unul din cele mai frumoase şi importante rezultate ale Mecanicii Cuantice. Atât utilizarea adjectivului "generală" cât şi a pluralului "relaţii", în locul singularului "relaţia", provine din faptul că microsistemul considerat este oarecare iar A şi B pot fi orice pereche de observabile necomutative ale sale. De asemenea, din însăşi metoda prin care au fost obţinute, putem observa că relaţiile de imprecizie (8.28) fac parte integrantă, atât din formalismul, cât şi din esenţa Mecanicii Cuantice şi (exact) din acest motiv au fost ridicate la rangul Principiului de Incertitudine [29], [30]

> *In orice stare cuantică a oricărui microsistem, determinarea simultană cu precizie absolută a valorilor oricăror două observabile necomutative ale sistemului este imposibilă, iar produsul abaterilor standard ale celor două observabile, în oricare din stările sistemului, verifică relaţia de imprecizie* (8.28).

In terminologia Mecanicii Cuantice, având în vedere prima parte a enunţului Principiului de Incertitudine, observabilele sunt denumite, mai corect (sub aspect fizic), observabile incomensurabile, sau, incompatibile. Legat de această denumire, dorim să subliniem, pentru evitarea oricăror confuzii, că termenul de "incomensurabile" nu se referă la imposibilitatea măsurării principial exacte a fiecăreia dintre observabile, ci la imposibilitatea măsurării simultane a lor cu precizie absolută. Referitor la observabilele care comută, atât între ele, cât şi cu hamiltonianul sistemului, ele poartă denumirea de (observabile) comensurabile (compatibile), iar mulţimea tuturor acestora reprezintă setul complet de observabile comensurabile care contribuie la determinarea univocă şi maximală a setului complet de funcţii proprii ale sistemului considerat.

B. RELATIILE DE IMPRECIZIE IMPULS-COORDONATA

O exemplificare, mai mult decât caracteristică, a relaţiilor de imprecizie (8.28) este cea în care observabila A corespunde componentei $\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^i}$ a impulsului $\hat{\boldsymbol{p}}$ al unei microparticule, iar observabila B corespunde componentei $\hat{x}^k = x^k$ a observabilei de poziţie $\hat{\boldsymbol{x}}$ a aceleiaşi microparticule. Cum

(8.29) $\left[\hat{p}_i, \hat{x}^k\right] = -i\hbar\delta_i^{\ k}$,

rezultă, prin indentificare cu relaţia (8.14),

(8.30) $\hat{C} = -\hbar\delta_i^{\ k}$

astfel încât, în orice stare $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3): \mathbb{R}^3 x \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ a particulei, avem

$$\langle\hat{C}\rangle = (\Psi, -\hbar\delta_i^k\Psi) = -\hbar\delta_i^k(\Psi,\Psi) = -\hbar\delta_i^k,$$

adică

(8.31) $|\langle\hat{C}\rangle| = \hbar\delta_i^{\ k}$

şi deci, relaţiile (8.28) iau forma vestitelor relaţii de imprecizie impuls-coordonată,

(8.32) $\Delta p_i \cdot \Delta x^k \geq \frac{1}{2}\hbar\delta_i^{\ k}$,

deduse pentru prima oară în anul 1927 de către Werner Heisenberg [28].

Pentru $i = k \in \{1,2,3\}$ relaţiile lui Heisenberg (8.32) evidenţiază un aspect cu totul neconvenţional din punct de vedere clasic:

în cazul oricărei microparticule, o coordonată şi impulsul canonic conjugat acesteia nu se pot determina simultan cu precizie absolută.

Această constatare este în totală contradicţie cu determinismul laplaceian, din modelul mecanicist al naturii, conform căruia condiţiile iniţiale, adică poziţia şi impulsul unei particule, se pot determina principial exact şi permit,

cunoscând acţiunea mediului înconjurător, adică a forţelor ce acţionează asupra particulei, stabilirea exactă a stărilor (mecanice) ulterioare ale particulei prin integrarea ecuaţiilor diferenţiale de mişcare. Ori, conform relaţiilor lui Heisenberg, în microcosmos, determinarea precisă a condiţiilor iniţiale de tip clasic este imposibilă şi deci, nici mişcarea clasică a microparticulei nu va mai putea fi prevăzută în mod exact. Din acest motiv, imediat după descoperirea lor, şi chiar mult timp după aceea, relaţiile de imprecizie impuls-coordonată au fost denumite *relaţii de nedeterminare*. Această terminologie, care a şi fost amplu exploatată de o serie de filozofi (de altfel remarcabili în domeniul lor), a adus Mecanicii Cuantice destul de multe deservicii, ajungându-se, aşa cum aminteam la începutul paragrafului, până la concluzia că sub aspect filozofic Mecanica Cuantică ar fi profund indeterministă. Deşi nu avem spaţiul şi timpul necesar discutării acestei probleme în cele mai mici amănunte, dorim totuşi să prezentăm principalele contraargumente aduse unei sentinţe atât de definitive. In sens strict, adică sub aspect fizico-matematic, o parte din acestea au fost analizate chiar la începutul paragrafului. O a doua parte are la bază proprietatea setului complet de observabile comensurabile de a permite stabilirea univocă a setului complet de funcţii proprii (ortonormale) asociate microsistemului. In baza acestei proprietăţi, pe de o parte starea iniţială a sistemului, adică $\Psi(t=0)$, va fi perfect determinată prin efectuarea unor măsurători simultane asupra tuturor observabilelor comensurabile, iar pe de altă parte, prin integrarea Ecuaţiei de Evoluţie cu condiţia iniţială $\Psi_0=\Psi(t=0)$, vom cunoaşte principial exact funcţia de stare a sistemului, exprimată (în general) sub forma unei dezvoltări seriale după setul complet de funcţii proprii comune tuturor observabilelor comensurabile, la orice moment ulterior $t>0$ şi vom putea estima corect probabilităţile de realizare a oricăreia din valorile permise ale oricărei alte observabile ce caracterizează microsistemul. Prin urmare, determinismul clasic, care este într-adevăr invalidat în Universul microscopic, nu trebuie confundat cu determinismul cuantic care se bucură de univocitate principial absolută la nivelul descrierii sistemului prin stările cuantice (şi nu clasice !) ale sale. Cu alte cuvinte, Mecanica Cuantică este doar clasic profund indeterministă şi nu este permisă extrapolarea acestei trăsături prin omiterea cuvântului "clasic", deoarece este mai mult decât evident, sub toate aspectele,

teoretice şi experimentale, că legile Fizicii Clasice sunt complet inoperaţionale în microcosmos. De altfel, punctul de vedere al Mecanicii Cuantice, bazat în mod esenţial pe caracterul dinamic interactiv al procesului de măsură, ne permite să atacăm (şi chiar într-o manieră destul de generală) determinismul clasic în punctul aparent cel mai invulnerabil, anume exactitatea sa absolută. Astfel, vom aminti, în primul rând, că cea mai mică eroare, comisă la efectuarea unei măsurători într-un sistem clasic, antrenează o imprecizie în ceea ce priveşte descrierea comportării ulterioare a sistemului. Aşadar, nici în mecanica clasică nu putem urmări un fenomen fizic în cele mai mici amănunte, căci orice măsurătoare implică din punct de vedere practic existenţa unei erori în estimarea rezultatului. In al doilea rând, atragem atenţia asupra faptului că relaţiile de imprecizie pot fi interpretate ca exprimarea, în limbaj matematic, a faptului că macroaparatul, de care ne servim azi în efectuarea unei măsurători, se găseşte în interacţiune cu microobiectul într-o aşa manieră, încât această interacţiune afectează rezultatul măsurătorii, introducând în el o eroare. In legătură atât cu această afirmaţie, cât şi cu întregul subiect pe care îl discutăm acum, este bine să reţinem răspunsul pe care îl vom da la următoarea întrebare. Din ce motive nu s-a ajuns la concluzii, să le spunem, indeterministe şi în cadrul Mecanicii Clasice? Răspunsul ca atare este destul de simplu : structura matematică a Fizicii Clasice, care consideră $\hbar=0$, permite o reprezentare printr-un model în care nu există nici o limitare principială a preciziei cu care măsurăm simultan valorile diverselor variabile canonic conjugate. Prin contrast, structura matematică a Mecanicii Cuantice, fundamentată pe interpretarea probabilistă a funcţiei de undă, nu mai admite o astfel de reprezentare şi în consecinţă va exista o limitare a preciziei măsurătorilor simultane efectuate asupra observabilelor incomensurabile, precum şi o imprăştiere a valorilor proprii ale fiecăreia dintre aceste observabile în cazul unei stări cuantice diferite de oricare din stările proprii corespunzătoare. In fine, mai amintim în al treilea rând, că în anul 1933 Fürth a demonstrat, în chiar cadrul statisticii clasice, existenţa unei relaţii de imprecizie de tip impuls-coordonată. Prin urmare, sub aspect fizico-matematic, putem spune că relaţiile lui Heisenberg îşi au originea în însăşi metodele statistice utilizate în studiul microcosmosului şi deci, este pe deplin justificată denumită de "relaţii de imprecizie", căci în fond, avem de a face cu o imprecizie datorată metodei şi nu cu un indeterminism filozofic.

Vom încheia acest subparagraf cu câteva exemple referitoare, pe de o parte, la compatibilitatea de principiu a relaţiilor de imprecizie impuls-coordonată, atât cu natura dual corpuscular-ondulatorie a microparticulelor, cât şi cu caracterul interactiv al procesului de măsură, iar pe de altă parte, (referitoare) la utilitatea relaţiilor lui Heisenberg în estimarea energiei fundamentale a unor microsisteme simple, cum sunt oscilatorul liniar armonic, atomul de Hidrogen şi atomul de Heliu.

(i) *Difracţia Fraunhofer pe "fantă lungă" a microparticulelor "monocinetice"*

Să ne imaginăm următorul experiment. Pe un ecran reprezentat de planul xOz şi având în lungul axei Ox o fantă de lărgime constantă $a=\Delta z$, este trimis la incidenţă normală (deci după direcţia axei Oy) un fascicul paralel de microparticule monocinetice, adică având toate acelaşi impuls $\vec{p}=p\vec{u}_y$ şi aceeaşi masă m. In baza caracterului ondulatoriu al acestora, va avea loc o difracţie Fraunhofer, astfel încât intensitatea fasciculului difractat (în regiunea $y\geq 0$) sub unghiul θ (măsurat în planul yOz, de la Oy către Oz) va fi dată de expresia binecunoscută

$$I=I_0\left[\frac{\sin\left(\pi\frac{a}{\lambda}\sin\theta\right)}{\pi\frac{a}{\lambda}\sin\theta}\right]^2, \tag{8.33}$$

unde I_0 este intensitatea fasciculului incident, iar

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{8.34}$$

este lungimea de undă de Broglie. In baza caracterului corpuscular, presupunând că împrăştierea în spaţiul fantei se face fără pierdere de energie, rezultă că microparticula deviată sub unghiul θ va avea o

componentă

(8.35) $\Delta p_z = p\sin\theta$,

a impulsului ei, după axa Oz. Inlocuind în (8.33) relaţiile (8.34) şi (8.35), ecuaţia

(8.36) $I = \frac{1}{2} I_0$,

care determină lărgimea maximului central, capătă forma concretă

(8.37) $$\left[\frac{\sin\left(\frac{\Delta z \cdot \Delta p_z}{2\hbar}\right)}{\left(\frac{\Delta z \cdot \Delta p_z}{2\hbar}\right)}\right]^2 = \frac{1}{2},$$

rezultând, cu o zecimală exactă, rădăcina

(8.38) $$\frac{\Delta z \cdot \Delta p_z}{2\hbar} = 1{,}4,$$

adică, obţinem relaţia

(8.39) $$\Delta p_z \cdot \Delta z \approx 3\hbar > \frac{1}{2}\hbar,$$

care concordă perfect cu relaţia Heisenberg (8.32) pentru observabilele incomensurabile z, p_z ale microparticulei difractate.

Ca interpretare fizică, şi în acelaşi timp ca o concluzie, rezultatul acestui experiment, sintetizat (în ce priveşte proprietăţile maximului central) în relaţia (8.39), demonstrează că între Principiul de Incertitudine şi caracterul dual al microobiectelor există o legătură de esenţă. Orice tentativă de reducere la zero a lărgimii $a = \Delta z$ a fantei, adică de cunoaştere precisă a coordonatei z din spaţiul ecranului pe unde au trecut particulele, va conduce la o creştere nelimitată a impreciziei Δp_z în măsurarea componentei p_z a impulsului, care va fi evidenţiată concret prin lărgirea indefinită a maximului central de

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

difracţie. Din contra, în cazul $\Delta p_z \to 0$, adică atunci când maximul central va avea o semilărgime unghiulară

$$\Delta\theta = \frac{2{,}8\hbar}{p\Delta z} = \frac{\Delta p_z}{p} \to 0$$

deosebit de redusă, lărgimea Δz a fantei va fi teoretic infinită şi deci nu va mai exista nici o posibilitate de determinare precisă a coordonatei z din spaţiul fantei pe unde a trecut microparticula.

(ii) *"X-Microscopul lui Heisenberg"*

Ideea acestui "experiment gândit", care îi aparţine lui Werner Heisenberg, este deosebit de simplă şi scoate în evidenţă destul de clar influenţa perturbatoare a procesului de măsură asupra microobiectului testat.

Să ne imaginăm aşadar că suntem în posesia unui microscop special, care, funcţionând cu radiaţii X, are o putere de rezoluţie cu mult mai mare decât cea a microscoapelor obişnuite. Presupunând că printr-o metodă oarecare am captat o microparticulă, de exemplu un electron, într-o zonă de dimensiuni reduse, aflată suficient de aproape, la scară macroscopică, de planul obiectivului, astfel încât unghiul solid sub care electronul "vede" obiectivul să fie aproximativ 2π, atunci, imprecizia minimă cu care vom cunoaşte poziţia electronului în planul obiect va corespunde "distanţei minime de rezoluţie"

(8.40) $\Delta x = 0{,}61\,\lambda_0$.

Dar, la iluminarea electronului cu radiaţii X, cu lungimea de undă λ_0, acesta va primi, prin efect Compton, un impuls de recul a cărui valoare va fi cuprinsă (cu diverse probabilităţi) în intervalul $-\frac{h}{\lambda_0}, \frac{h}{\lambda_0}$ adică va avea o împrăştiere a valorii sale de ordinul

(8.41) $\Delta p_x \sim 2\frac{h}{\lambda_0}$.

Din (8.40) şi (8.41), rezultă imediat, atât forma particulară

(8.42) $\Delta p_x \cdot \Delta x \sim h > \frac{1}{2}\hbar$

a relaţiei (8.32) a lui Heisenberg, cât şi faptul că pentru $\lambda_0 \to 0$, când am cunoaşte exact poziţia electronului, împrăştierea Δp_x a impulsului acestuia ar fi complet nelimitată.

(iii) *Estimarea "energiei de zero" a oscilatorului liniar armonic*

După cum ştim din Mecanica Analitică, oscilatorul liniar armonic este un sistem conservativ, cu un singur grad de libertate $x \in (-\infty, \infty)$, descris de hamiltonianul

(8.43) $H = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2}kx^2$,

unde $p = m_0\dot{x}$ este impulsul mecanic (canonic conjugat lui x) al particulei de masă m_0, iar k este aşa numita constantă elastică prin care se exprimă proporţionalitatea forţei (elastice)

(8.44) $F = -\frac{dV}{dx} = -kx$

cu abaterea x a particulei de la poziţia de echilibru $x_e = 0$. Evident, din ecuaţiile Hamilton

(8.45)

a) $\dot{x} = \frac{1}{m_0}p$

b) $\dot{p} = -kx$,

obţinem ecuaţia (clasică) de mişcare

(8.46) $\ddot{x}+\omega_0^2 x=0$,

în care am notat cu

(8.47) $\omega_0^2=\frac{k}{m_0}$

pătratul pulsaţiei proprii a oscilaţiilor particulei, în jurul poziţiei $x_e=0$, sub acţiunea forţei (8.44). Din punct de vedere clasic, este limpede că în starea de echilibru static $x_e(t)=0$, oscilatorul are $p_e(t)=m_0\dot{x}_e(t)=0$ şi, deci, energia sa fundamentală $E_0^{(cl)}=H(x_e=0,p_e=0)$ va fi identic nulă. Din punct de vedere cuantic, situaţia este complet diferită, deoarece observabilele x şi

(8.48) $H=\frac{1}{2m_0}p^2+\frac{1}{2}m_0\omega_0^2x^2$,

fiind incomensurabile, adică

(8.49) $[\hat{H},\hat{x}]=\frac{1}{2m_0}[\hat{p}^2,\hat{x}]=-i\frac{\hbar}{m_0}\hat{p}\neq 0$,

funcţiile proprii ale lui $\hat{H}$, în raport cu care se exprimă funcţia de stare $\Psi(x,t)$ a sistemului, nu sunt şi funcţii proprii ale lui $\hat{x}$ şi astfel, în orice stare proprie a lui $\hat{H}$, când $\Delta H\equiv 0$, observabila x va prezenta o abatere standard $\Delta x>0$, care va exista, evident, şi în cazul stării proprii de energie minimă. Atunci, din relaţia de imprecizie impuls-coordonată, rezultă că impulsul microparticulei va prezenta şi el o abatere minimă

(8.50) $\Delta p=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{\Delta x}$.

Prin urmare, ajungem la concluzia că, sub aspect cuantic, hamiltonianul oscilatorului va fi în mod esenţial pozitiv

(8.51) $H=\frac{\hbar^2}{8m_0}\cdot\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{2}m_0\omega_0^2(\Delta x)^2>0$

şi va prezenta, în raport cu abaterea standard $\Delta x\in\mathbb{R}_+$, o valoare minimă (pozitivă) E_0, numită energia de zero (a stării fundamentale) a oscilatorului cuantic.

Intr-adevăr, din

(8.52) $\frac{dH}{d(\Delta x)}=m_0\omega_0^2(\Delta x)-\frac{\hbar^2}{4m_0}\cdot\frac{1}{(\Delta x)^3}=0,$

obţinem

(8.53) $(\Delta x)_0=\left[\frac{\hbar}{2m_0\omega_0}\right]^{1/2}$

şi observăm că pentru $\Delta x=(\Delta x)_0$ avem

(8.54) $\frac{d^2H}{d(\Delta x)^2}\Big|_{\Delta x=(\Delta x)_0}=m_0\omega_0^2+\frac{3\hbar^2}{4m_0}\cdot\frac{1}{(\Delta x)_0^4}=4m_0\omega_0^2>0,$

adică hamiltonianul (8.51) are "în" Δx_0, dat de (8.53), valoarea minimă

(8.55) $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0,$

reprezentând energia de zero, de origine eminamente cuantică, a oscilatorului armonic.

(iv) *Estimarea energiei fundamentale a atomului de hidrogen*

Deoarece acest sistem, descris de hamiltonianul

(8.56) $H=\frac{1}{2m_0}|\vec{p}|^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r},$

l-am discutat în detaliu în capitolul II, din punct de vedere al "Vechii

Teorii a Cuantelor" (Modelul Bohr şi Modelul Bohr-Sommerfeld-Wilson), vom trece direct la sublinierea rolului relaţiei de imprecizie

(8.57) $\Delta p \cdot \Delta r \propto \hbar$

în calculul energiei nivelului fundamental. Inspectând forma (8.56) a hamiltonianului problemei, observăm că la nivelul fizicii clasice, "cea mai mică valoare" a acestuia corespunde valorilor

(8.58)

a) $p_r = m_0 \dot{r} = 0$

b) $p_\theta = m_0 r \dot{\theta} = 0$

c) $p_\varphi = m_0 r \sin\theta \dot{\varphi} = 0$

d) $r = 0$

ale componentelor impulsului mecanic al electronului şi a razei vectoare r a acestuia, astfel încât

(8.59) $E_0^{(cl)} = -\infty$.

Din punctul de vedere al Mecanicii Cuantice, şi nu al Vechii Teorii a Cuantelor, putem presupune, ceea ce de altfel se poate demonstra riguros, că este adevărat că în starea fundamentală a electronului în atomul de hidrogen, modurile rotaţionale de mişcare nu sunt excitate şi deci, vom avea pentru H expresia

(8.60) $H = \frac{1}{2m_0} p^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$,

în care $p = m_0 \dot{r}$ este impulsul canonic conjugat coordonatei radiale r.

Cum $[\hat{H}, \hat{r}] = -\frac{i\hbar}{m_0} \hat{p} \neq 0$, rezultă, în mod cu totul analog cazului (iii), că va exista o dispersie $\Delta r > 0$ a valorilor observabilei r şi, din (8.57), o dispersie

(8.61) $\Delta p \propto \frac{\hbar}{\Delta r}$

a observabilei p. In raport cu acestea, hamiltonianul (8.60) devine

(8.62) $H = \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{(\Delta r)}$

şi va prezenta, pentru

(8.63) $(\Delta r)_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2}$,

un <u>minim</u> $\left(\frac{dH}{d\Delta r}[(\Delta r)_0] = 0, \frac{d^2H}{d(\Delta r)^2}[(\Delta r)_0] > 0 \right), H((\Delta r)_0)$ ce corespunde exact energiei

(8.64) $E_H = -\frac{m_0}{2}\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\right]^2$

a nivelului fundamental în atomul de hidrogen.

(v) <u>*Energia stării fundamentale a atomului de heliu*</u>

In acest caz, hamiltonianul sistemului are expresia

(8.65) $H = \frac{1}{2m_0}|\vec{p}_1|^2 + \frac{1}{2m_0}|\vec{p}_2|^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$,

pe care o simplificăm presupunând nu numai că modurile rotaţionale <u>nu</u> sunt excitate, deci $|\vec{p}_1| = p_1 = m_0\dot{r}_1$ şi $|\vec{p}_2| = p_2 = m_0\dot{r}_2$, dar şi că starea fundamentală este o stare de simetrie <u>maximală</u>, adică $p_1 = p_2 = p$ (în valoare absolută) şi $r_1 = r_2 = r$, iar $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = 2r$. Rezultă astfel

(8.66) $H = \frac{p^2}{m_0} - \frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$,

BCU ALEXANDRU IOAN CUZA UNIVERSITY LIBRARY

abaterile standard ale observabilelor r,p satisfăcând "în continuare" relaţia de imprecizie

$$\Delta p \cdot \Delta r \simeq \hbar .$$

Prin aceeaşi metodă ca la exemplele anterioare, avem

$$(8.67)\quad H = \frac{\hbar}{m_0}\cdot\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{\Delta r},$$

iar condiţia de extremum

$$(8.68)\quad \frac{dH}{d(\Delta r)}\Big|_{(\Delta r)_0} = \frac{1}{(\Delta r_0)^2}\left[\frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0} - \frac{2\hbar^2}{m_0}\cdot\frac{1}{(\Delta r)_0}\right] = 0$$

ne oferă

$$(8.69)\quad (\Delta r)_0 = \frac{16\pi\varepsilon_0\hbar^2}{7m_0e^2},$$

pentru care hamiltonianul (8.67) are valoarea <u>minimă</u> (se poate verifica uşor)

$$(8.70)\quad E_{He} = -m_0\left[\frac{7e^2}{16\pi\varepsilon_0\hbar}\right]^2 \Leftrightarrow E_{He} = \frac{49}{8}E_H,$$

corespunzătoare energiei pe starea fundamentală a atomului de heliu. Referitor la aceasta (formula (8.70)) se impune un scurt comentariu. Spre deosebire de rezultatele (8.55) şi (8.64), despre care se poate arăta că sunt regăsite <u>exact</u> sub aceeaşi formă prin integrarea (exactă) a ecuaţiei Schrödinger pentru oscilatorul liniar armonic şi, respectiv, pentru atomul de hidrogen, rezultatul (8.70) nu coincide cu formula

$$(8.71)\quad E_{He}^{(0)} = \frac{1}{8}\left(\frac{27}{4}\right)^2 E_H,$$

care dă o estimare mai corectă a energiei fundamentale a atomului de heliu, obţinută prin aplicarea unei metode consistent formulată în cadrul Mecanicii Cuantice şi anume Metoda Perturbativă. Oricum, rămâne un fapt remarcabil că o metodă <u>atât de simplă</u>, bazată pe hamiltonianul

(8.66) şi forma (8.57) a relaţiei lui Heisenberg, permite estimarea cu o eroare relativă de numai

$$\frac{\Delta E}{E}=\frac{E_{He}-E_{He}^{(0)}}{E_{He}^{(0)}}=7{,}5\,\%$$

a energiei stării fundamentale a unui sistem cuantic destul de complex, cum este atomul de Heliu, care nu este exact integrabil prin nici una din metodele teoretice avansate utilizate în Mecanica Cuantică.

C. STARI COERENTE SI STARI COMPRIMATE

Dintre exemplele din subparagraful B, referitoare la aplicabilitatea relaţiilor de imprecizie impuls-coordonată, cazul (iii), al oscilatorului armonic, este cu siguranţă cel mai interesant sub aspectul consistenţei formulării sale şi a rigurozităţii metodei utilizate, deoarece se bazează chiar pe "forma exact-minimală"

$$\Delta p\cdot\Delta x=\frac{\hbar}{2}$$

a relaţiilor lui Heisenberg, denumită adesea (mai corect) "egalitatea lui Heisenberg".

Investigarea analitică a funcţiilor $\Psi(x,t):\mathbb{R}x\mathbb{R}\to\mathbb{C}$, din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, corespunzătoare stărilor cuantice în care abaterile standard a observabilelor x şi p verifică egalitatea lui Heisenberg, reprezintă mai mult decât un simplu exerciţiu, dat fiind că aceste stări, a căror existenţă a fost confirmată experimental, formează, metaforic vorbind, una din cele mai bune "imagini de înaltă definiţie" a racordării continue, la limită, a Mecanicii Cuantice la Mecanica Clasică. O mai bună precizare a sensului acestei afirmaţii ne vom strădui să o dăm în cele ce urmează.

După cum putem constata uşor, analizând metoda prin care am

dedus forma generală (8.28) a relaţiilor de imprecizie, egalitatea lui Heisenberg, în care

$$\hat{F}=\hat{p}-<p>\ ,\ \hat{G}=\hat{x}-<x>,$$

va fi satisfăcută în acele stări din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R})$, $\Psi:\mathbb{R}x\mathbb{R}\to\mathbb{C}$, care sunt soluţii în orice moment $t\in\mathbb{R}$ ale ecuaţiei

(8.72) $[\hat{F}-i\lambda(t)\hat{G}]\Psi(x,t)=0\ ,\ \lambda(t)\in\mathbb{R},$

obţinută din relaţia (8.19) prin impunerea egalităţii cu zero. Rezultă astfel ecuaţia

(8.73) $$\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\left[\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t))-\frac{i}{\hbar}\bar{p}(t)\right]\Psi=0,$$

în care am notat (pentru simplificarea scrierii) $\bar{x}(t)=<x>(t)$ şi $\bar{p}(t)=<p>(t)$ valorile medii la momentul t ale observabilelor x şi p în starea desemnată de soluţia $\Psi(x,t)$ care are expresia

(8.74) $$\Psi(x,t)=N(t)\exp\left\{-\frac{\lambda(t)}{2\hbar}[x-\bar{x}(t)]^2+\frac{i}{\hbar}\bar{p}(t)[x-\bar{x}(t)]-\frac{i}{\hbar}\phi(t)\right\}.$$

Observăm imediat că funcţia $\lambda(t)$ trebuie să fie pozitiv definită, oricare ar fi $t\in\mathbb{R}$, pentru ca $\Psi(x,t)$ să fie din $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R})$ şi, de asemenea, că putem determina funcţia $N(t):\mathbb{R}\to\mathbb{R}_+$ din condiţia de normare

(8.75) $$\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi(x,t)|^2dx=1,$$

adică

$$N^2(t)\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\lambda(t)}{\hbar}[x-\bar{x}(t)]^2}dx=\sqrt{\frac{\hbar}{\lambda(t)}}\cdot N^2(t)\cdot\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\zeta^2}d\zeta=1,$$

de unde rezultă

(8.76) $N(t)=\left(\frac{\lambda(t)}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

şi astfel, funcţia normată din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ în raport cu care abaterile standard ale coordonatei şi impulsului satisfac egalitatea lui Heisenberg, are expresia generală

(8.77)
$$\Psi(x,t)=\left[\frac{\lambda(t)}{\pi\hbar}\right]^{1/4}\cdot$$
$$\cdot\exp\left\{-\frac{\lambda(t)}{2\hbar}[x-\bar{x}(t)]^2+\frac{i}{\hbar}\bar{p}(t)[x-\bar{x}(t)]-\frac{i}{\hbar}\Phi(t)\right\}$$

în care atât funcţia reală $\phi(t)$ cât şi celelalte trei funcţii (de variabila t) $\lambda,\bar{x},\bar{p}$ rămân deocamdată nespecificate. Inainte de a merge mai departe, este deosebit de util să probăm consistenţa soluţiei (8.77), în sensul că trebuie să fie satisfăcute identităţile:

(8.78) a) $$\langle x\rangle_\Psi=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\,x\,\Psi(x,t)\,dx\equiv\bar{x}(t)$$

b) $$\langle p\rangle_\Psi=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]dx\equiv\bar{p}(t)$$

c) $$(\Delta p)^2_\Psi\cdot(\Delta x)^2_\Psi=\left[\langle p^2\rangle_\Psi-\langle p\rangle^2_\Psi\right]\cdot\left[\langle x^2\rangle_\Psi-\langle x\rangle^2_\Psi\right]\equiv\frac{\hbar^2}{4}.$$

In adevăr, în ce priveşte (8.78.a), avem

(8.79)
$$\langle x\rangle_\Psi=\left(\frac{\lambda(t)}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\cdot x\cdot\exp\left[-\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t))^2\right]=$$
$$=\left[\frac{\hbar}{\pi\lambda(t)}\right]^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\zeta e^{-\zeta^2}d\zeta+\bar{x}(t)\left[\left(\frac{\lambda(t)}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,e^{-\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t))^2}\right]$$

şi cum

$$\int_{-\infty}^{\infty} \zeta e^{-\zeta^2} d\zeta \equiv 0 \text{ iar } \left(\frac{\lambda}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot e^{-\frac{\lambda}{\hbar}(x-\bar{x})^2} \equiv 1,$$

rezultă, aşa cum era de aşteptat,

$$\langle x \rangle_\Psi \equiv \bar{x}(t).$$

Utilizând

$$(8.80)\quad \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -\left[\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t)) - \frac{i}{\hbar}\bar{p}(t)\right]\cdot\Psi,$$

obţinem, pentru (8.78.b), forma concretă

$$(8.81)\quad \langle p \rangle_\Psi = i\lambda(t)\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x-\bar{x}(t))\Psi\, dx + \bar{p}(t)\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx,$$

care se reduce, având în vedere (8.78.a) şi (8.75), la identitatea

$$\langle p \rangle_\Psi \equiv \bar{p}(t).$$

Pentru a proba (8.78.c) să începem cu calculul lui $(\Delta x)^2_\Psi$, adică

$$(\Delta x)^2_\Psi = \langle x^2 \rangle_\Psi - \bar{x}^2(t) = \int_{-\infty}^{\infty} [(x-\bar{x}(t)) + \bar{x}(t)]^2 |\Psi|^2 dx - \bar{x}^2(t) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} [x-\bar{x}(t)]^2 |\Psi|^2 dx + 2\bar{x}(t)\int_{-\infty}^{\infty} [x-\bar{x}(t)]|\Psi|^2 dx =$$

$$= \left(\frac{\lambda(t)}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot (x-\bar{x}(t))^2 \exp\left[-\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t))^2\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{\lambda(t)} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \zeta^2 e^{-\zeta^2} d\zeta = \frac{\hbar}{\lambda(t)} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

şi deci

$$(8.82)\quad (\Delta x)^2_\Psi = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{\lambda(t)}.$$

Din (8.80) deducem

BUCUREŞTI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(8.83) $$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\left\{\frac{\lambda(t)}{\hbar}-\left[\frac{\lambda(t)}{\hbar}(x-\bar{x}(t))-\frac{i}{\hbar}\bar{p}(t)\right]^2\right\}\cdot\Psi,$$

ceea ce ne conduce, pentru calculul lui $(\Delta p)^2_\Psi$, la şirul de relaţii

$$(\Delta p)^2_\Psi=<p^2>_\Psi-\bar{p}^2(t)=-\int_{-\infty}^{\infty}\hbar^2\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx-\bar{p}^2(t)=$$

$$=\hbar\lambda(t)-\int_{-\infty}^{\infty}[\lambda(t)(x-\bar{x}(t))-i\bar{p}(t)]^2\,|\Psi|^2dx-\bar{p}^2(t)=$$

$$=\hbar\lambda(t)-\lambda^2(t)\int_{-\infty}^{\infty}(x-\bar{x}(t))^2|\Psi|^2dx$$

şi cum

$$\int_{-\infty}^{\infty}(x-\bar{x}(t))^2|\Psi|^2dx=\frac{\hbar}{2\lambda(t)},$$

obţinem pentru $(\Delta p)^2_\Psi$ expresia

(8.84) $$(\Delta p)^2_\Psi=\frac{1}{2}\hbar\lambda(t)$$

al cărei produs cu (8.82) verifică (8.78.c), oricare ar fi $\lambda(t):\mathbb{R}\to\mathbb{R}_+$.

Pentru ca o funcţie normată de tipul (8.77) să reprezinte efectiv starea cuantică de la momentul $t((\forall)t\in\mathbb{R})$ a unui microsistem conservativ cu un singur grad de libertate, ea trebuie să fie o soluţie a Ecuaţiei de Evoluţie

(8.85) $$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

pentru o formă a energiei potenţiale $V(x):\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ ce va fi determinată, după cum vom vedea, tot din ecuaţia (8.85), şi va identifica tipul microsistemului considerat. Folosind (8.83) şi (8.77), ecuaţia (8.85) se

BUJAC CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

scrie

$$\frac{\hbar\lambda}{2m_0}-\frac{1}{2m_0}[\lambda\cdot(x-\bar{x})-i\bar{p}]^2+V(x)=$$

(8.86)
$$=\frac{i\hbar\frac{d\lambda}{dt}}{4\lambda}-\frac{i\frac{d\lambda}{dt}}{2}(x-\bar{x})^2+i\lambda\frac{d\bar{x}}{dt}(x-\bar{x})-\frac{d\bar{p}}{dt}(x-\bar{x})+\bar{p}\frac{\bar{x}}{dt}+\frac{d\phi}{dt}.$$

Având în vedere că funcţiile $\lambda,\bar{x},\bar{p}$ şi ϕ sunt independente de coordonata x, obţinem, prin derivări succesive după x ale ecuaţiei (8.85) următoarele ecuaţii:

a)
$$\left(\frac{\lambda^2}{m_0}-i\frac{d\lambda}{dt}\right)x-\frac{dV}{dx}+i\lambda\left(\frac{d\bar{x}}{dt}-\frac{1}{m_0}\bar{p}\right)-$$
$$-\left[\frac{d\bar{p}}{dt}+\left(\frac{\lambda^2}{m_0}-i\frac{d\lambda}{dt}\right)\bar{x}\right]=0$$

(8.87)

b)
$$\frac{\lambda^2}{m_0}-i\frac{d\lambda}{dt}-\frac{d^2V}{dx^2}=0.$$

Din (8.87.b), dat fiind că λ şi V sunt funcţii reale, rezultă imediat

a)
$$\frac{d\lambda}{dt}=0\Leftrightarrow\lambda=\lambda_0\in\mathbb{R}_+$$

(8.88)

b)
$$\frac{dV}{dx}=C_1+\frac{\lambda_0^2}{m_0}\cdot x\ ,\ C_1\in\mathbb{R},$$

iar (8.87.a) devine

(8.89)
$$\left[\frac{d\bar{p}}{dt}+\frac{\lambda_0^2}{m_0}\bar{x}+C_1\right]-i\lambda_0\left[\frac{d\bar{x}}{dt}-\frac{1}{m_0}\bar{p}\right]=0,$$

adică,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(8.90)

a) $$\frac{d\bar{x}}{dt}=\frac{1}{m_0}\bar{p}$$

b) $$\frac{d\bar{p}}{dt}=-\frac{\lambda_0^2}{m_0}\bar{x}-C_1,$$

ceea ce înseamnă, după cum ne aşteptam de altfel, având în vedere Teoremele lui Ehrenfest, că valorile medii ale observabilelor x şi p satisfac ecuaţiile canonice ale lui Hamilton, corespunzătoare în cazul acesta unei particule nerelativiste, de masă m_0, supusă acţiunii unei forţe de tipul

(8.91) $$F(x)=-\frac{dV}{dx}=-C_1-\frac{\lambda_0^2}{m_0}x,$$

derivată din energia potenţială

(8.92) $$V(x)=C_2+C_1x+\frac{\lambda_0^2}{2m_0}x^2\ ,\ C_2\in\mathbb{R}.$$

Dar (8.92) se poate scrie

$$V(x)=\left[C_2-\frac{m_0}{2\lambda_0^2}C_1^2\right]+\frac{\lambda_0^2}{2m_0}\left(x+\frac{m_0}{\lambda_0^2}C_1\right)^2$$

şi cum calibrarea nivelului de zero al energiei potenţiale este arbitrară, vom lua

(8.93) $$C_2=\frac{m_0}{2\lambda_0^2}C_1^2,$$

astfel încât, efectuând şi translaţia

(8.94) $$\underline{x}=x+\frac{m_0}{\lambda_0^2}C_1,$$

aducem expresia (8.92) la forma

$$V(x)=\frac{\lambda_0^2}{2m_0}x^2,$$

care ne spune clar că în esenţă sistemul pe care îl analizăm este un oscilator (cuantic) liniar armonic, iar

(8.95) $\lambda_0=m_0\omega_0$.

Astfel, în (8.92) putem considera direct $C_1=C_2=0$, deci (cu (8.95))

(8.96) $V(x)=\frac{1}{2}m_0\omega_0^2x^2$,

deoarece translaţia (8.94) şi calibrarea (8.93) ne vor permite oricând analiza cazului $C_1\neq 0, C_2\neq 0$. In aceste condiţii, ecuaţiile clasice de mişcare se scriu

(8.97)

a) $$\frac{d\bar{x}}{dt}=\frac{1}{m_0}\bar{p}$$

b) $$\frac{d\bar{p}}{dt}=-m_0\omega_0^2\bar{x}$$

şi utilizându-le, împreună cu relaţiile (8.95) şi (8.96), în ecuaţia (8.86), aceasta devine

(8.98) $$\frac{d\phi}{dt}=\frac{\hbar\omega_0}{2}-\left(\frac{1}{2m_0}\overline{p^2}-\frac{1}{2}m_0\omega_0^2\overline{x^2}\right).$$

Pentru aducerea la o formă mai convenabilă a parantezei din (8.98), observăm că, înmulţind (8.97.a) cu $\bar{p}$, (8.97.b) cu $\bar{x}$ şi adunându-le, avem

$$\frac{1}{2m_0}\overline{p^2}-\frac{1}{2}m_0\omega_0^2\overline{x^2}=\frac{d}{dt}\left[\frac{1}{2}\overline{px}\right],$$

de unde rezultă, prin înlocuire în (8.98) şi integrare după t, expresia

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

funcţiei $\phi(t)$, adică

$$\phi(t) = -\frac{1}{2}\overline{p}\overline{x} + \frac{\hbar\omega_0}{2}t. \tag{8.99}$$

Cu (8.95) şi (8.99) funcţia normată (8.77) devine concret

$$\Psi(x,t) = \left[\frac{m_0\omega_0}{\pi\hbar}\right]^{1/4} \cdot \exp\left\{-\frac{m_0\omega_0}{2\hbar}(x-\overline{x})^2 + \frac{i}{\hbar}\left[\overline{p}\left(x-\frac{\overline{x}}{2}\right) - \frac{\hbar\omega_0}{2}t\right]\right\} \tag{8.100}$$

şi reprezintă efectiv stările cuantice ale oscilatorului armonic în care valorile medii ale observabilelor x şi p satisfac ecuaţiile de mişcare (8.97) ale oscilatorului clasic, iar abaterile standard Δx şi Δp au simultan, în orice moment, cea mai mică valoare posibilă

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_0\omega_0}}\ ,\ \Delta p = \sqrt{\frac{m_0\hbar\omega_0}{2}}\ . \tag{8.101}$$

Aceste stări poartă denumirea de "stări cuantice coerente".

In cazul particular al soluţiei banale $\overline{x}=0, \overline{p}=0$ a ecuaţiilor de mişcare (8.97), adică atunci când din punct de vedere clasic oscilatorul este în repaus (în poziţia de echilibru static), funcţia de stare (8.100) are expresia

$$\Psi_0(x,t) = \left(\frac{m_0\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \exp\left[-\frac{m_0\omega_0}{2\hbar}x^2 - \frac{i}{\hbar}\cdot\frac{\hbar\omega_0}{2}t\right], \tag{8.102}$$

din care deducem, comparând-o cu "forma standard" pentru o stare staţionară

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right],$$

că starea fundamentală ($n=0$) a oscilatorului armonic are într-adevăr energia de zero (8.55) şi este în plus o stare coerentă. Exact această proprietate explică complet de ce estimarea energiei de zero prin metoda utilizată în exemplul (iii) din subparagraful B este absolut

corectă.

Prin definiţie, se numesc stări cuantice comprimate acele stări în care abaterea standard a uneia din observabilele x,p poate fi făcută oricât de mică. Cu alte cuvinte, starea comprimată este o stare coerentă în care impulsul sau coordonata poate fi determinat(ă) cu o precizie foarte mare, asimptotic oricât de bună. Astfel, în cazul regimului nerelativist, când de altfel şi este valabilă analiza pe care tocmai am efectuat-o, observăm că trebuie să evităm "situaţiile" $m_0 \to 0$ şi $\omega_0 \to \infty$ şi deci, pentru stările x-comprimate vom avea condiţia $m_0 \to \infty$, adică practic microparticula va fi o particulă (clasică), iar în mod complementar, pentru stările p-comprimate vom avea $\omega_0 \to 0$, ceea ce înseamnă, dat fiind că $\omega_0 = (k/m_0)^{1/2}$ şi m_0 este fixat, îndeplinirea condiţiei $k \to 0$, adică o acţiune foarte slabă pe unitatea de lungime a forţei elastice exercitate asupra microparticulei. In concluzie, stările coerente ale unui oscilator "greu" (la scară microscopică) sunt practic x-comprimate, iar cele ale unui oscilator "lent" (în sensul $k \to 0$) sunt stări p-comprimate.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCUIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CAPITOLUL VI

FORMALISMUL MATEMATIC AL MECANICII CUANTICE II:

FORMALISMUL DIRAC PE SPATIUL LINIAR ABSTRACT $\mathscr{E}$ AL VECTORILOR DE STARE

In 1928, pentru a conferi o supleţe matematică mai pronunţată formalismului dezvoltat de Schrödinger pe spaţiul $\mathfrak{L}^2$ al funcţiilor de undă, Paul Adrien Maurice Dirac efectuează o generalizare a acestuia, elaborând vestitul formalism $<bra|ket>$, care operează pe un spaţiu liniar abstract $\mathscr{E}$, ale cărui elemente, denumite vectori de stare, identifică stările cuantice posibile ale microsistemului [2], [20], [21].

Spre deosebire de capitolul precedent, în care starea sistemului este definită prin intermediul funcţiei de undă $\psi(\vec{r})$, analogia cu poziţia unei particule în spaţiul $\mathbb{R}^3$ prin intermediul coordonatelor sale fiind imediată, vectorii ket sunt elemente ale unui spaţiu liniar abstract, notat cu $\mathscr{E}$ şi numit spaţiul stărilor. Noul formalism ia în considerare şi alte mărimi caracteristice particulelor, cum ar fi spinul, permiţând şi studiul unor sisteme fizice ale căror descriere nu se poate face cu ajutorul funcţiei de undă.

Evident, unul dintre obiectivele prezentului capitol este acela de a rescrie elementele de Mecanică Cuantică studiate în capitolul precedent, în termenii formalismului $<bra|ket>$. O atenţie deosebită este acordată noţiunii de observabilă, insistându-se asupra importanţei cunoaşterii setului complet de

observabile asociate unui microsistem, în vederea determinării complete şi unice a stării acestuia. Prin alegerea reprezentărilor fundamentale $\{|\vec{r}>\}$ şi $\{|\vec{p}>\}$, se realizează legătura formalismului propus de Dirac cu mecanica ondulatorie, privită ca o realizare în $\mathfrak{L}^2$ a spaţiului liniar abstract $\mathscr{E}$.

VI.1. Formalismul *<bra|ket>* introdus de Dirac

După cum am arătat, introducerea vectorilor de stare, ca elemente ale unui spaţiu liniar abstract, numit spaţiul stărilor şi notat cu $\mathscr{E}$, ne conduce nu doar la o simplificare a formalismului prezentat în capitolul anterior ci şi la o generalizare a lui.

Utilizând notaţiile lui Dirac, vom prezenta în cele ce urmează formalismul axiomatic *<bra|ket>*.

A. VECTORII *|ket>* CA ELEMENTE ALE SPATIULUI $\mathscr{E}$

Stările cuantice ale unui sistem fizic sunt reprezentate prin vectori de stare aparţinând spaţiului abstract $\mathscr{E}$ al stărilor sistemului. Un element al spaţiului $\mathscr{E}$ se numeşte vector ket (sau, pe scurt ket) şi se notează cu simbolul $|>$, în interiorul căruia se scrie o etichetă (litere sau cifre) ce distinge vectorii între ei.

De exemplu, funcţiei de undă (V.1.21) ce descrie comportarea microparticulei în groapa de potenţial monodimensională cu pereţi infiniţi, îi putem asocia vectorul ket $|\psi_n\rangle$, sau simplu $|n>$. Astfel

(1.1) $\psi_n(x) \in \mathfrak{L}^2(\mathbb{R}) \leftrightarrow |\psi_n\rangle \in \mathscr{E}(\mathbb{R})$.

Deci, funcţiilor de undă dependente de o singură variabilă x le asociem

elemente ale spaţiului stărilor unei singure particule (cazul monodimensional) $\mathcal{E}(\mathbb{R})$. Deoarece în acest caz spaţiile $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ şi $\mathcal{E}(\mathbb{R})$ sunt izomorfe, se pot transfera regulile de calcul vectorial din $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ în $\mathcal{E}(\mathbb{R})$.

B. PRODUSUL SCALAR, SPAŢIUL DUAL $\mathcal{E}^*(D)$ SI VECTORII $<bra|$

Pentru a defini în spaţiul $\mathcal{E}$ al vectorilor $|ket>$ analogul produsului scalar (φ, ψ) din mecanica ondulatorie, trebuie mai întâi să introducem spaţiul liniar dual al lui $\mathcal{E}$, notat cu $\mathcal{E}^*$, ale cărui elemente vor juca rolul lui φ^*. Un element al spaţiului $\mathcal{E}^*$ se numeşte vector bra (sau, pe scurt bra) şi se notează cu $<|$, în interiorul căruia se scrie eticheta ce distinge vectorii între ei, în cazul nostru $<\varphi|$ (şi nu $<\varphi^*|$). Un vector bra $<\varphi| \in \mathcal{E}^*$ reprezintă funcţionala liniară definită pe vectorii $|\psi> \in \mathcal{E}$, adică operaţia liniară care asociază fiecărui vector ket $|\psi> \in \mathcal{E}$, un număr complex $\varphi(|\psi>)$, pe care îl vom nota cu

(1.2) $\varphi(|\psi>) = <\varphi|\psi>$,

liniaritatea fiind exprimată prin

(1.3) $<\varphi|(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)> = a_1<\varphi|\psi_1> + a_2<\varphi|\psi_2>$.

Mulţimea acestor funcţionale liniare formează spaţiul liniar $\mathcal{E}^*$, numit spaţiul dual al lui $\mathcal{E}$.

Prin intermediul produsului scalar pe spaţiul Hilbert $\mathcal{E}$, vom asocia fiecărui vector ket $|\varphi> \in \mathcal{E}$ un vector bra $<\varphi| \in \mathcal{E}^*$, definit ca funcţionala liniară care asociază oricărui element $|\psi> \in \mathcal{E}$ numărul complex egal cu produsul scalar $(|\varphi>, |\psi>)$. Iată deci că scriind unul după altul un vector bra

şi un vector ket (ordinea este esenţială) vom înţelege că este vorba de produsul lor scalar, adică, utilizând notaţia (1.2), avem

(1.4) $\langle\varphi|\psi\rangle=(|\varphi\rangle,|\psi\rangle)$.

Acum putem explica provenienţa denumirilor de bra şi ket. Fiecare semn, $\langle\cdot|$ sau $|\cdot\rangle$, constituie o jumătate din paranteza produsului scalar $(\cdot,\cdot)$. Deoarece, în limba engleză *bracket* înseamnă paranteză, tăierea acestui cuvânt în cele două jumătăţi *bra-(c)-ket*, l-a condus pe Dirac la alegerea denumirilor de *bra* şi *ket*.

Utilizând notaţiile lui Dirac, vom transcrie în continuare proprietăţile produsului scalar.

a) Axiomele definiţiei produsului scalar, V.2.14, se scriu sub forma:

(1.5)

I. $\langle\psi|\psi\rangle\geq 0,(\forall)\,\psi\in\mathscr{E}\,;\ \langle\psi|\psi\rangle=0\Leftrightarrow|\psi\rangle=0\,;$

II. $\langle\psi|a\varphi\rangle=a\langle\psi|\varphi\rangle,\ (\forall)a\in\mathbb{C};$

III. $\langle\psi+\varphi,\chi\rangle=\langle\psi|\chi\rangle+\langle\varphi|\chi\rangle\,;$

IV. $\langle\psi|\varphi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle^*$ ceea ce arată că $\langle\psi|\psi\rangle$ este real şi nenegativ.

b) In spaţiul $\mathscr{E}$ produsul scalar este liniar în raport cu al doilea vector.

Demonstraţie. Vectorii $|\psi\rangle$ şi $|\varphi\rangle$ fiind elemente ale unui spaţiu liniar, rezultă că şi combinaţia liniară

(1.6) $$|\eta\rangle=a|\psi\rangle+b|\varphi\rangle,\ a,b\in\mathbb{C},\ (\forall)\,|\psi\rangle,|\varphi\rangle\in\mathscr{E}$$

este de asemenea un element al lui $\mathscr{E}$. Atunci, pentru orice $\langle\chi|\in\mathscr{E}^*$, putem scrie, utilizând definiţia V.2.14 şi teorema V.2.16,

(1.7) $$\langle\chi|\eta\rangle=(|\chi\rangle,a|\psi\rangle+b|\varphi\rangle)=a\langle\chi|\psi\rangle+b\langle\chi|\varphi\rangle.$$

(q.e.d.)

c) In spaţiul $\mathscr{E}$ produsul scalar este antiliniar în raport cu primul vector.

Demonstraţie. Spaţiul dual $\mathscr{E}^*$ fiind liniar, rezultă că combinaţia

(1.8) $$\langle\chi| = c\langle\psi| + d\langle\varphi|,\ c,d\in\mathbb{C},(\forall)\langle\psi|,\langle\varphi|\in\mathscr{E}^*$$

este de asemenea un element al lui $\mathscr{E}^*$. Conform definiţiei V.2.14 şi teoremei V.2.16, acţiunea lui $\langle\chi|$ asupra vectorului ket $|\xi\rangle\in\mathscr{E}$ se scrie sub forma

(1.9) $$\langle\chi|\xi\rangle = (c|\psi\rangle + d|\varphi\rangle, |\xi\rangle) = c^*\langle\psi|\xi\rangle + d^*\langle\varphi|\xi\rangle.$$

(q.e.d.)

In continuare, vom arăta că vectorul bra $c^*\langle\psi| + d^*|\varphi\rangle$ este dualul vectorului ket $c|\psi\rangle + d|\varphi\rangle$. Din (1.5.II) rezultă că dacă $|\chi\rangle$ este un vector ket atunci şi $|a\chi\rangle = a|\chi\rangle, a\in\mathbb{C}$, este un vector ket. Conjugând complex relaţia (1.5.II)

$$\langle\xi|a\chi\rangle^* = \langle a\chi|\xi\rangle = a^*\langle\chi|\xi\rangle,$$

observăm că dualul vectorului $|a\chi\rangle$ este vectorul

(1.10) $$\langle a\chi| = a^*\langle\chi|.$$

Considerăm acum vectorul $|\chi\rangle = |\psi\rangle + |\varphi\rangle$. Atunci, din (1.7), rezultă imediat că

$$\langle\xi|\chi\rangle = \langle\xi|\psi\rangle + \langle\xi|\varphi\rangle,$$

care, prin conjugare complexă, ne conduce la

(1.11) $$\langle\xi|\chi\rangle^* = \langle\chi|\xi\rangle = (|\psi\rangle + |\varphi\rangle, |\xi\rangle),$$

adică la dualul vectorului ket $|\psi\rangle + |\varphi\rangle$, care este vectorul bra $\langle\psi| + \langle\varphi|$. In concluzie la cele arătate mai sus, putem afirma că vectorul bra $c^*\langle\psi| + d^*\langle\varphi|$ este dualul vectorului ket $c|\psi\rangle + d|\varphi\rangle$.

In încheierea acestui subparagraf, vom enunţa axiomele care

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

stau la baza formalismului *<bra|ket>*.

A1. Vectorii de stare formează un spaţiu liniar complex abstract $\mathscr{E}$, ale cărui elemente se numesc vectori ket şi se notează cu $|>$, spaţiul $\mathscr{L}^2$ fiind doar o realizare particulară a lui $\mathscr{E}$;

A2. Asociem fiecărui ket un obiect nou, numit bra, notat cu $<|$, cu următoarele proprietăţi:

- Dacă unui ket $|\psi>$ îi corespunde un bra $<\psi|$, atunci lui $|\psi>+|\varphi>$ îi corespunde $<\psi|+<\varphi|$;
- Vectorului ket $a|\psi>$ îi corespunde vectorul bra $a^*<\psi|$.

Vectorii bra formează un spaţiu liniar complex $\mathscr{E}^*$ numit dualul lui $\mathscr{E}$.

A3. Oricărei perechi de vectori $<\varphi|$ şi $|\psi>$ îi corespunde un număr complex egal cu produsul scalar al celor doi vectori şi notat cu $<\varphi|\psi>$.

A4. Impunem ca faţă de norma indusă de acest produs scalar spaţiul să fie complet astfel ca $\mathscr{E}$ să fie spaţiu Hilbert.

C. OPERATORI LINIARI

Pentru început vom defini acţiunea operatorilor liniari în spaţiul Hilbert al vectorilor ket.

Un operator liniar $\hat{A}: \mathscr{E} \to \mathscr{E}$ face să corespundă fiecărui vector ket $|\varphi> \in \mathscr{E}$ un alt vector ket

$$|\psi>=\hat{A}|\varphi>. \tag{1.12}$$

In notaţiile lui Dirac, axiomele de aditivitate şi omogenitate din

definiţia operatorilor liniari V.4.7 se vor rescrie sub forma:

$$\text{a)} \quad \hat{A}(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{A}|\varphi\rangle$$

(1.13)

$$\text{b)} \quad \hat{A}(a|\psi\rangle) = a\hat{A}|\psi\rangle,$$

iar condiţia necesară şi suficientă (V.4.10) ca operatorul $\hat{A}$ să fie liniar, devine

(1.14) $$\hat{A}(a|\psi\rangle + b|\varphi\rangle) = a\hat{A}|\psi\rangle + b\hat{A}|\varphi\rangle.$$

Deoarece, conform teoremei V.4.7, suma şi produsul a doi operatori liniari sunt la rândul lor operatori liniari, putem defini acţiunea acestora asupra elementelor spaţiului $\mathscr{E}$, ca fiind

(1.15) $$(\hat{A} + \hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$$

şi

(1.16) $$(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle).$$

Ordinea de aplicare a operatorilor în (1.16) este foarte importantă, deoarece în general $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Relaţia (1.16) ne permite să definim acţiunea operatorului unitar $U = e^{i\hat{A}}$, $\hat{A}$ fiind un operator liniar autoadjunct, asupra vectorilor ket. Pentru aceasta, scriem pe U ca o dezvoltare în serie şi îl aplicăm asupra lui $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$. Astfel

(1.17) $$U|\psi\rangle = \sum_k \frac{i^k}{k!}(\hat{A})^k|\psi\rangle,$$

unde $(\hat{A})^k$ înseamnă că operatorul $\hat{A}$ se aplică lui $|\psi\rangle$ de k ori.

După cum am arătat anterior, fiecărui vector ket $|\varphi\rangle \in \mathscr{E}$ îi corespunde vectorul bra $\langle\varphi| \in \mathscr{E}^*$. Fixând vectorul bra $\langle\varphi|$, pentru fiecare ket $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$, numărul complex $\langle\varphi|\psi\rangle$ reprezintă produsul lor scalar. Vom arăta acum că prin scrierea acestor operatori în ordine inversă (vectorul ket este urmat de vectorul bra) se obţine un operator.

Intr-adevăr,

(1.18) $\hat{F} = |\psi><\varphi|$

acţionează asupra unui vector ket $|\chi> \in \mathscr{E}$ astfel

(1.19) $\hat{F}|\chi> = |\psi><\varphi|\chi> = a|\psi>$,

unde am notat produsul scalar $<\varphi|\chi>$ cu a şi am utilizat proprietatea evidentă $|\psi>a = a|\psi>$. Desigur, numerele complexe îşi pot schimba locul fără să afecteze rezultatul obţinut, adică

(1.20) $$|\psi>a = a|\psi> \;\; ; \;\; <\psi|a = a<\psi| \;\; ;$$
$$<\varphi|a|\psi> = a<\varphi|\psi> \;\; ; \;\; \hat{A}|a\psi> = a\hat{A}|\psi>.$$

Acţiunea operatorului liniar $\hat{A}$ asupra elementelor spaţiului dual $\mathscr{E}^*$

(1.21) $<\varphi|\hat{A} = <\psi|$

este definită prin relaţia

(1.22) $<\psi|\xi> = (<\varphi|\hat{A})|\xi> = <\varphi|(\hat{A}|\xi>)$, pentru orice $|\xi> \in \mathscr{E}$.

Operatorul $\hat{A}$ face să corespundă fiecărui vector bra $<\varphi| \in \mathscr{E}^*$ au alt vector bra $<\varphi|\hat{A} = <\psi| \in \mathscr{E}^*$. Pentru a demonstra că această corespondenţă păstrează liniaritatea lui $\hat{A}$, vom utiliza liniaritatea spaţiului $\mathscr{E}^*$, adică

(1.23) $(c<\psi| + d<\varphi|)|\xi> = c<\psi|\xi> + d<\varphi|\xi>$,

în definiţia (1.22) şi obţinem

(1.24) $$\{(c<\psi| + d<\varphi|)|\hat{A}\}|\xi> = (c<\psi| + d<\varphi|)(\hat{A}|\xi>) =$$
$$= c<\psi|(\hat{A}|\xi>) + d<\varphi|(\hat{A}|\xi>) = c(<\psi|\hat{A})|\xi> + d(<\varphi|\hat{A})|\xi>,$$

adică

(1.25) $(c<\psi| + d<\varphi|)\hat{A} = c<\psi|\hat{A} + d<\varphi|\hat{A}$,

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ceea ce era de demonstrat. Un calcul similar ne permite să definem acţiunea operatorului sumă şi produs ca fiind

(1.26) $\langle\psi|(\hat{A}+\hat{B}) = \langle\psi|\hat{A} + \langle\psi|\hat{B}$

şi respectiv

(1.27) $\langle\psi|(\hat{A}\hat{B}) = (\langle\psi|\hat{A})\hat{B}$.

Relaţia de definiţie (1.22) ne arată că prezenţa parantezei nu este necesară şi deci putem renunţa la ea, adică

(1.28) $(\langle\varphi|\hat{A})|\xi\rangle = \langle\varphi|(\hat{A}|\xi\rangle) \equiv \langle\varphi|\hat{A}|\xi\rangle$.

In continuare, utilizând teorema V.4.16 care asociază unui operator liniar continuu pe întreg spaţiul Hilbert un operator liniar continuu $\hat{A}^+$, numit adjunctul lui $\hat{A}$, vom studia acţiunea operatorului $\hat{A}^+$ asupra vectorilor bra şi ket. Pentru aceasta, transcriem conjugata complexă a relaţiei (V.4.16.a), adică

(1.29) $(\varphi, \hat{A}^+\psi) = (\psi, \hat{A}\varphi)^*$,

în notaţiile Dirac

(1.30) $\langle\varphi|(\hat{A}^+|\psi\rangle) = \{\langle\psi|(\hat{A}|\varphi\rangle)\}^*$

de unde, eliminând parantezele, obţinem relaţia ce defineşte acţiunea operatorului liniar $\hat{A}^+$ asupra vectorilor ket $|\psi\rangle$

(1.31) $\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\varphi\rangle^*$.

Această ecuaţie pune în evidenţă dualul vectorului ket $\hat{A}|\varphi\rangle$ ca fiind vectorul bra $\langle\varphi|\hat{A}^+$, adică, formal, putem defini conjugata hermitică a relaţiei $\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle$ ca fiind $\langle\psi|\hat{A}^+ = \langle\varphi|$.

Regulă practică. In notaţiile lui Dirac, conjugata hermitică a unei expresii se obţine înlocuind fiecare vector ket cu dualul său, vectorii bra cu vectorii duali corespunzători, operatorii cu adjunctul lor, constantele cu conjugatele complexe şi schimbând ordinea factorilor în produs. Vom demonstra această regulă în cazul operatorului $|\xi\rangle\langle\eta|$.

Intr-adevăr, utilizând relaţia (1.31) şi schimbând locul constantelor în mod convenabil, putem scrie

$$\langle\psi|(|\xi\rangle\langle\eta|)^+|\varphi\rangle=(\langle\varphi|\xi\rangle\langle\eta|\psi\rangle)^*=\langle\varphi|\xi\rangle^*\langle\eta|\psi\rangle^*=$$

$$=\langle\eta|\psi\rangle^*\langle\varphi|\xi\rangle^*=\langle\psi|\eta\rangle\langle\xi|\varphi\rangle=\langle\psi|(|\eta\rangle\langle\xi|)\varphi\rangle,$$

de unde obţinem că

(1.32) $$|\xi\rangle\langle\eta|^+=|\eta\rangle\langle\xi|.$$

In cazul expresiilor mai complicate se aplică regula de mai sus în mod formal, scoţând în faţă constantele complexe. De exemplu, conjugatul hermitic al operatorului $a|\psi\rangle\langle\xi|\hat{A}|\eta\rangle$ este

$$(a|\psi\rangle\langle\xi|\hat{A}|\eta\rangle)^+=a^*\langle\eta|\hat{A}^+|\xi\rangle\langle\psi|.$$

In capitolul anterior au fost demonstrate relaţiile V.4.19 satisfăcute de operatorii mărginiţi. Prin utilizarea formalismului *<bra|ket>*, cu aplicarea regulii practice prezentate mai sus, demonstrarea relaţiilor

a) $$(\hat{A}^+)^+=\hat{A}$$

b) $$(a\hat{A})^+=a^*\hat{A}^+$$

c) $$(\hat{A}+\hat{B})^+=\hat{A}^++\hat{B}^+$$

d) $$(\hat{A}\hat{B})^+=\hat{B}^+\hat{A}^+$$

este imediată. Astfel, pentru relaţia a), conjugăm hermitic de două ori relaţia (1.12) şi obţinem mai întâi $\langle\psi|=\langle\varphi|\hat{A}^+$ şi apoi $|\psi\rangle=(\hat{A}^+)^+|\varphi\rangle$ care, comparată cu (1.12), ne conduce la $(\hat{A}^+)^+=\hat{A}$. Relaţia b) rezultă din (1.31), ţinând cont că schimbarea locului numerelor complexe nu afectează rezultatul, astfel:

$$\langle\varphi|(a\hat{A})^+|\psi\rangle=\langle\psi|(a\hat{A})|\varphi\rangle^*=a^*\langle\varphi|\hat{A}^+|\psi\rangle.$$

Conjugăm hermitic expresia (1.15) şi obţinem

$$\langle\psi|(\hat{A}+\hat{B})^+=\langle\psi|\hat{A}^++\langle\psi|\hat{B}^+,$$

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică tocmai proprietatea c). In fine, pentru a demonstra relaţia d), vom acţiona, în mod succesiv, cu operatorii $\hat{B}$ şi $\hat{A}$ asupra vectorului ket $|\varphi>$ şi obţinem expresiile $|\psi>=\hat{B}|\varphi>$ şi respectiv $|\xi>=\hat{A}|\psi>=\hat{A}\hat{B}|\varphi>$, din a căror conjugare hermitică rezultă

$$<\xi|=<\psi|\hat{A}^{+}=<\varphi|\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}=<\varphi|(\hat{A}\hat{B})^{+}.$$

Dacă operatorul liniar $\hat{A}:\mathcal{E}\to\mathcal{E}$ este autoadjunct, adică $\hat{A}^{+}=\hat{A}$, atunci relaţia (1.31) devine

(1.33) $$<\varphi|\hat{A}^{+}|\psi>=<\varphi|\hat{A}|\psi>=<\psi|\hat{A}|\varphi>^{*},$$

iar conjugata hermitică a relaţiei $\hat{A}|\psi>=|\varphi>$ este $<\psi|\hat{A}=<\varphi|$.

In încheierea acestei prezentări a operatorilor liniari ce acţionează pe spaţiul abstract al stărilor vom defini un operator hermitic de care ne vom ocupa, mai pe larg, în paragraful următor. Astfel, vectorului ket $|\psi>\in\mathcal{E}$, normat la unitate

(1.34) $$<\psi|\psi>=1,$$

îi ataşăm operatorul definit prin

(1.35) $$\hat{\Pi}_{\psi}=|\psi><\psi|,$$

a cărui acţiune asupra unui vector ket oarecare $|\varphi>\in\mathcal{E}$

(1.36) $$\hat{\Pi}_{\psi}|\varphi>=|\psi><\psi|\varphi>=<\psi|\varphi>|\psi>$$

justifică denumirea "geometrică" dată acestui operator de proiector pe un vector ket. Intr-adevăr, din (1.36), observăm că rezultatul acţiunii operatorului $\hat{\Pi}_{\psi}$ asupra ket-ului $|\varphi>$ este un vector coliniar cu $|\psi>$, reprezentând "proiecţia" unui vector ket $|\varphi>$ oarecare pe vectorul $|\psi>$. Proiectorul are proprietatea importantă

(1.37) $$\hat{\Pi}_{\psi}^{2}=\hat{\Pi}_{\psi}$$

a cărei demonstraţie este imediată, ţinând cont de (1.34), adică

$\hat{\Pi}_\psi^2 = \hat{\Pi}_\psi \hat{\Pi}_\psi = |\psi><\psi|\psi><\psi| = |\psi><\psi| = \hat{\Pi}_\psi$.

Hermiticitatea operatorului rezultă imediat din (1.32), considerând $|\xi> = |\eta> = |\psi>$.

Proprietăţile operatorilor liniari, prezentate în cadrul acestui paragraf, ne permit să enunţăm încă o axiomă, care se adaugă la cele formulate anterior şi care stau la baza formalismului Dirac, anume

A5. Dacă $\hat{A}$ este un operator liniar ce acţionează în $\mathscr{E}$, atunci el acţionează şi în $\mathscr{E}^*$ conform relaţiei (1.22). Operatorul $\hat{A}^+$, adjunctul operatorului $\hat{A}$, se defineşte prin (1.30), vectorii duali $\hat{A}|\psi>$ şi $<\psi|\hat{A}^+$ fiind "conjugaţi hermitic" unul altuia. Dacă $\hat{A} = \hat{A}^+$, atunci operatorul $\hat{A}$ este hermitic şi este valabilă relaţia (1.33).

VI.2. Reprezentări în spaţiul stărilor

In cadrul acestui paragraf ne vom ocupa de reprezentările vectorilor bra şi ket în spaţiul stărilor, precum şi de reprezentarea matricială a operatorilor pe $\mathscr{E}$ în formalism Dirac, urmând ca problema schimbării reprezentărilor să constituie subiectul paragrafului următor.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

A. RELATII DE ORTONORMARE SI INCHIDERE

A lucra într-o reprezentare presupune alegerea unei baze ortonormale în spaţiul abstract al vectorilor ket. Transcriem relaţia (V.2.1) în notaţiile *<bra|ket>* şi avem

(2.1) $|\psi>=\sum_i d_i|i>$, cu $d_i=<i|\psi>$,

unde am convenit să notăm cu

(2.2) $|i>=|\chi_i\rangle$.

Sirul discret $\{|i>\}=|1>,...,|i>,...$ este o bază în $\mathscr{E}$ satisfăcând condiţia de ortonormalitate

(2.3) $<i|j>=\delta_{ij}$.

Scrierea relaţiei (2.1) sub forma

(2.4) $|\psi>=\sum_i |i><i|\psi>$

pune în evidenţă operatorul identitate pe $\mathscr{E}$

(2.5) $\hat{I}=\sum_i |i><i|$.

Reciproc, relaţia (2.5) exprimă faptul că şirul discret $\{|i>\}$ este o bază în $\mathscr{E}$, deoarece orice vector ket $|\psi>\in\mathscr{E}$ se poate exprima ca o combinaţie liniară unică de forma

(2.6) $|\psi>=\hat{I}|\psi>=\sum_i |i><i|\psi>=\sum_i d_i|i>$; $d_i=<i|\psi>$.

Operatorul identitate poate acţiona şi la stânga asupra unui vector bra, conducând la relaţia

(2.7) $<\psi|=<\psi|\hat{I}=\sum_i <\psi|i><i|$,

care nu este altceva decât conjugata hermitică a relaţiei (2.4). Scrierea

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

vectorului bra ca o combinaţie liniară unică de vectori $\{\langle i|\}$ sub forma

(2.8) $\langle\psi| = \sum_i d_i^* \langle i|$ cu $d_i^* = \langle\psi|i\rangle$,

ne arată că şirul $\{\langle i|\}$ este baza duală a lui $\{|i\rangle\}$. Subliniem faptul că relaţia (2.5) de definiţie a operatorului identitate este adevărată numai dacă suma se extinde asupra bazei în întregime.

Relaţia (2.5) poartă numele de relaţia de închidere şi ea permite scrierea produsului scalar sub forma

(2.9) $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{I}|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|i\rangle\langle i|\psi\rangle = \sum_i c_i^* d_i$,

în care numerele complexe c_i şi d_i nu reprezintă altceva decât proiecţia vectorilor $|\varphi\rangle$ şi $|\psi\rangle$ pe vectorul $|i\rangle$ al bazei.

Extindem acum noţiunea de proiector pe un vector ket $\hat{\Pi}_i$, introdusă prin (1.35), la cea de proiector pe subspaţiul subîntins de baza $\{|i\rangle\}$, prin

(2.10) $\hat{\Pi}_{\{|i\rangle\}} = \sum_i |i\rangle\langle i| = \sum_i \hat{\Pi}_i$,

caz în care el coincide cu operatorul identitate. Dacă ne limităm la un subspaţiu al lui $\mathcal{E}$, subîntins de n vectori ortonormali $|1\rangle, \ldots, |j\rangle, \ldots, |n\rangle$, atunci proiectorul pe acest subspaţiu se defineşte prin

(2.11) $\hat{\Pi}_{(n)} = \sum_{j=1}^{n} |j\rangle\langle j|$

şi satisface evident relaţia (1.37) deoarece

(2.12) $\hat{\Pi}_{(n)}^2 = \sum_{k,j=1}^{n} |j\rangle\langle j|k\rangle\langle k| = \sum_{k,j=1}^{n} |j\rangle\langle k|\delta_{jk} = \hat{\Pi}_{(n)}$

dar nu mai coincide cu operatorul identitate. Acţiunea sa asupra unui vector ket, anume

(2.13) $\hat{\Pi}_{(n)}|\psi\rangle=\sum_{j=1}^{n}|j\rangle\langle j|\psi\rangle=\sum_{j=1}^{n}d_j|j\rangle\ ;\ d_j=\langle j|\psi\rangle,$

este egală cu suma proiecţiilor vectorului $|\psi\rangle$ pe cei n vectori ce alcătuiesc baza subspaţiului. In plus, pentru vectorii bazei spaţiului $\mathcal{E}$, care nu aparţin şirului $\{|1\rangle,...,|j\rangle,...,|n\rangle\}$, este valabilă relaţia

(2.14) $\Pi_{(n)}|k\rangle=\sum_{j=1}^{n}|j\rangle\langle j|k\rangle=0;\ k=n+1,...,$

ce rezultă imediat prin aplicarea relaţiei de ortonormalitate (2.3).

Vom transcrie în continuare relaţiile prezentate în cadrul acestui subparagraf pentru cazul în care şirul discret $\{|i\rangle\}$ este înlocuit cu şirul continuu de vectori ket generalizaţi $\{|\alpha\rangle\}$. Astfel, relaţia (2.1) devine

(2.15) $|\psi\rangle=\int d\alpha\, d(\alpha)|\alpha\rangle$ cu $d(\alpha)=\langle\alpha|\psi\rangle$;

punând în evidenţă baza ortogonală

(2.16) $\langle\alpha|\alpha'\rangle=\delta(\alpha-\alpha')$

şi operatorul identitate pe $\mathcal{E}$

(2.17) $\hat{I}=\int d\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha|$.

Acţiunea operatorului identitate asupra unui vector bra conduce la relaţia

(2.18) $\langle\psi|=\int d\alpha\langle\psi|\alpha\rangle\langle\alpha|=\int d\alpha\, d^*(\alpha)\langle\alpha|$,

care este conjugata hermitică a relaţiei

(2.19) $|\psi\rangle=\int d\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle=\int d\alpha\, d(\alpha)|\alpha\rangle$.

Noua formă a relaţiei de închidere este (2.17) şi ea permite scrierea produsului scalar al vectorilor ket $|\varphi\rangle$ şi $|\psi\rangle$ ca fiind

(2.20) $<\varphi|\psi>=\int d\alpha <\varphi|\alpha><\alpha|\psi>=\int d\alpha\, c^*(\alpha)d(\alpha)$.

Ca şi în cazul bazei discrete, proiectorul pe spaţiul subîntins de baza continuă $\{|\alpha>\}$ coincide cu operatorul identitate :

(2.21) $\hat{\Pi}_{\{|\alpha>\}}=\int d\alpha\,|\alpha><\alpha|=\hat{I}$,

relaţia (1.37) putând fi verificată imediat, deoarece

(2.22)
$$\hat{\Pi}^2_{\{|\alpha>\}}=\int d\alpha\, d\beta\,|\alpha><\alpha|\beta><\beta|\,\delta(\alpha-\beta)=$$
$$=\int d\alpha\,|\alpha><\alpha|=\hat{\Pi}_{\{|\alpha>\}}.$$

Un avantaj esenţial al formalismului *<bra|ket>* este acela că permite elaborarea unei metode elegante de calcul "în spectru continuu" utilizând relaţiile de ortogonalitate şi închidere (2.16) şi respectiv (2.17) ale bazelor continue, reciproc duale $\{|\alpha>\}$ şi $\{<\alpha|\}$, ceea ce va conduce la o analiză unitară a problemei de vectori şi valori proprii pentru operatorii autoadjuncţi cu spectru mixt (discret şi continuu pe porţiuni)[1].

Observaţie. Proiectorii ne permit să definim restricţia unui operator liniar $\hat{A}$ pe un subspaţiu al lui $\mathscr{E}$. Pentru aceasta, să considerăm

(2.23) $\{|p>\}=\{|1>,...,|m>\}$

ca fiind baza ortonormală ce subîntinde subspaţiul $\mathscr{E}_m$ al vectorilor de stare. Tinând cont de relaţia (2.3) satisfăcută de baza ortonormală pe $\mathscr{E}$, putem scrie

(2.24) $<i|j>=\delta_{ij}$, pentru $i,j\le m$

şi

(2.25) $<i|j>=0$, pentru i sau j strict mai mari ca m.

---

[1] "Integrala" a fost folosită aici în sensul formal de transcriere a relaţiilor din teoria distribuţiilor [66].

Cu ajutorul operatorului de proiecţie pe acest subspaţiu

(2.26) $\hat{\Pi}_{(m>)} = \sum_{i=1}^{m} |i><i|$

putem defini restricţia operatorului $\hat{A}$ la subspaţiul $\mathscr{E}_m$ prin

(2.27) $\hat{A}_m = \hat{\Pi}_{(m)} \hat{A} \hat{\Pi}_{(m)}$,

acţiunea acestuia asupra unui vector ket din $\mathscr{E}_m$ fiind

(2.28) $\hat{A}_m |\psi> = \hat{\Pi}_{(m)} \hat{A} \hat{\Pi}_{(m)} |\psi>$.

Dar, conform (2.13), expresia

(2.29) $\hat{\Pi}_{(m)} |\psi> \equiv |\psi>_m$

reprezintă chiar proiecţia ortogonală a vectorului $|\psi> \in \mathscr{E}$ pe $\mathscr{E}_m$. Deci, relaţia (2.28) se scrie ca fiind

(2.30) $\hat{A}_m |\psi> = \hat{\Pi}_{(m)} \hat{A} |\psi>_m$

şi ea explică modul de acţiune al restricţiei operatorului $\hat{A}$ la subspaţiul $\mathscr{E}_m$ asupra unui element $|\psi> \in \mathscr{E}$. Astfel, vectorul ket $|\psi>$ este proiectat ortogonal pe $\mathscr{E}_m$, operatorul $\hat{A}$ transformându-l apoi într-un alt vector din $\mathscr{E}$, care, la rândul său, va fi proiectat în $\mathscr{E}_m$.

In mod analog, se poate defini proiecţia unui vector bra pe subspaţiul $\mathscr{E}_m^*$, obţinându-se conjugata hermitică a relaţiei (2.29), adică

(2.31) $<\psi| \hat{\Pi}_{(m)} \equiv <\psi|_m$,

ceea ce ne va permite să obţinem relaţia

(2.32) $<\psi| \hat{A}_m |\varphi> = <\psi| \hat{\Pi}_{(m)} \hat{A} \hat{\Pi}_{(m)} |\varphi> = <\psi|_m \hat{A} |\varphi>_m$,

asupra căreia vom reveni în paragraful următor, după prezentarea mecanicii matriciale.

B. OBSERVABILE CA MATRICI

Formalismul propriu studiului proceselor microscopice a apărut pe două căi aparent disticte : mecanica ondulatorie iniţiată de L. de Broglie şi mecanica matricială iniţiată de W. Heisenberg, legătura dintre cele două formalisme fiind indicată de către E. Schrödinger în anul 1926. Urmând calea lui Schrödinger, vom prezenta în cele ce urmează metoda matricială a Mecanicii Cuantice.

(i) *Reprezentarea matricială a operatorilor*

Fie $\{|i>\}$ o bază în spaţiul vectorilor de stare, iar $\hat{A}, \hat{B}, \ldots$ operatori liniari ce acţionează pe $\mathscr{E}$. Ataşăm operatorului $\hat{A}$ o matrice (A) ale cărei elemente sunt definite prin relaţia

(2.33) $A_{ik} = <i|\hat{A}|k>$,

unde primul indice desemnează linia iar al doilea coloana. Observăm că numărul complex A_{ik} este chiar produsul scalar al vectorilor ket $|i>$ şi $\hat{A}|k>$ (transformata vectorului $|k>$ prin acţiunea operatorului $\hat{A}$). Pentru baza continuă $\{|\alpha>\}$, elementele matriciale sunt definite prin

(2.34) $A(\alpha, \alpha') = <\alpha|\hat{A}|\alpha'>$

şi ele reprezintă puncte de coordonate α (abscisa) şi α' (ordonata), într-o matrice cu un număr continuu de linii şi coloane, în acest caz termenul de matrice, ca tabel de numere complexe, pierzându-şi sensul, iar produsul matricilor realizându-se prin integrare, in loc de sumare.

Pentru a transpune formalismul $<bra|ket>$, prezentat în acest capitol, în formalism de matrici, trebuie să lămurim ce corespunde diferitelor aplicaţii (adunarea şi înmulţirea operatorilor, conjugarea hermitică etc.) în tratare matricială. Să notăm suma şi produsul

operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ cu

(2.35) $\hat{S}=\hat{A}+\hat{B}$ şi $\hat{P}=\hat{A}\hat{B}$,

acţiunea lor asupra vectorilor bra şi ket fiind definită prin (1.15), (1.16) şi (1.26), (1.27). Cu ajutorul lui (2.33) vom avea

$$<i|\hat{S}|k>=<i|(\hat{A}+\hat{B})|k>=<i|(\hat{A}|k>+\hat{B}|k>)=$$

$$=<i|\hat{A}|k>+<i|\hat{B}|k>=A_{ik}+B_{ik},$$

adică

(2.36) $S_{ik}=A_{ik}+B_{ik}$,

deci matricile se adună element cu element. Astfel, sumei operatorilor îi corespunde suma matricilor. Procedăm în mod similar şi pentru operatorul produs şi obţinem

$$<i|\hat{P}|k>=<i|\hat{A}\hat{B}|k>=<i|\hat{A}\hat{I}\hat{B}|k>=$$

$$=\sum_j <i|\hat{A}|j><j|\hat{B}|k>=\sum_j A_{ij}B_{jk},$$

adică

(2.37) $P_{ik}=\sum_j A_{ij}B_{jk}$,

aceasta fiind tocmai regula de înmulţire a două matrici. Astfel, produsului de operatori îi corespunde produsele matricilor asociate operatorilor.

Elementele matriciale ale operatorului adjunct $\hat{A}^+$ al operatorului $\hat{A}$ se obţin, aplicând (1.30), astfel

(2.38) $(\hat{A}^+)_{ik}=<i|\hat{A}^+|k>=<k|\hat{A}|i>^*=A^*_{ki}$,

adică sunt elementele unei matrici, obţinute din (A) prin transpunere (schimbarea liniilor cu coloanele) şi conjugare complexă. Matricea astfel obţinută se numeşte matrice adjunctă şi se notează cu $(A)^+$. In consecinţă, operatorului adjunct lui $\hat{A}$, notat cu $\hat{A}^+$ îi corespunde

matricea adjunctă lui (A), notată cu $(A)^+$, adică

(2.39) $(A^+)=(A)^+$.

In cazul bazei $\{|\alpha>\}$ operaţiile (2.35), (2.37) şi (2.38) se scriu sub forma

(2.40) $S(\alpha,\alpha')=A(\alpha,\alpha')+B(\alpha,\alpha')$

(2.41) $P(\alpha,\alpha')=\int d\beta\, A(\alpha,\beta)B(\beta,\alpha')$

(2.42) $A^+(\alpha,\alpha')=A^*(\alpha',\alpha)$.

Cunoaşterea matricii (A) caracterizează perfect operatorul $\hat{A}$.

Intr-adevăr, operatorul $\hat{A}$ face ca unui vector ket $|\varphi>$ să-i corespundă univoc un ket $|\psi>$, adică

(2.43) $|\psi>=\hat{A}|\varphi>$.

Inmulţim scalar această relaţie cu $<i|$, intercalăm operatorul identitate şi obţinem

(2.44) $<i|\psi>=\sum_j <i|\hat{A}|j><j|\varphi>$.

Dar, vectorii ket $|\varphi>$ sau $|\psi>$ sunt determinaţi dacă se cunosc componentele lor $<k|\varphi>$ sau $<i|\psi>$, în baza ortonormală $\{|i>\}$. Să condiderăm aceste componente ca formând o matrice unicolonară, adică

(2.45) $(\varphi)=\begin{pmatrix} <i|\varphi> \\ <2|\varphi> \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}$.

Atunci, relaţia (2.44) se scrie sub forma

(2.46) $(\psi)=(A)(\varphi)$,

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ceea ce confirmă afirmaţia de mai sus.

Conjugata hermitică a relaţiei (2.43)

(2.47) $\langle\psi| = \langle\varphi|\hat{A}^+$,

înmulţită scalar cu $|i\rangle$, ne conduce, după intercalarea operatorului identitate, la relaţia

(2.48) $\langle\psi|i\rangle = \sum_j \langle\varphi|j\rangle\langle j|\hat{A}^+|i\rangle$,

care ne permite să asociem vectorului bra $\langle\varphi|$ matricea unilinie cuprinzând elementele $\langle\varphi|j\rangle$

(2.49) $(\varphi) = (\langle\varphi|1\rangle, \langle\varphi|2\rangle, \ldots)$.

Atunci, relaţia (2.48) devine

(2.50) $(\psi) = (\varphi)(A)^+$.

In concluziile, după fixarea bazei ortonormale pe $\mathscr{E}$, vectorii şi operatorii vor fi reprezentaţi prin nişte numere complexe ce alcătuiesc matrici, diferitele operaţii vectoriale fiind înlocuite cu operaţiile cu matrici definite prin (2.35), (2.37), (2.39). De exemplu, produsul scalar $\langle\varphi|\psi\rangle$ va fi calculat ca produsul de matrici

(2.51) $\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|i\rangle\langle i|\psi\rangle = (\varphi)(\psi)$,

adică, utilizând notaţiile $d_i^* = \langle\varphi|i\rangle$ şi $c_i = \langle i|\psi\rangle$, avem

$$(2.52)\quad \langle\varphi|\psi\rangle = \sum_i d_i^* c_i = \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ . \end{pmatrix}.$$

Intercalarea unui operator $\hat{A}$ în interiorul produsului scalar conduce la inserarea unei matrici pătratice între cele două matrici din (2.52), adică

$$(2.53)\quad \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle=\sum_{i,j}\langle\varphi|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\psi\rangle=\sum_{i,j}d_i^*A_{ij}c_j,$$

sau, scriind matricile corespunzătoare, avem

$$(2.54)\quad \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle=\begin{pmatrix}d_1^* & d_2^* & \dots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12} & \dots\\ A_{21} & A_{22} & \dots\\ \dots & \dots & \dots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ \dots\end{pmatrix}.$$

Trecerea la baza $\{\langle\alpha|\}$ se face simplu, înlocuind relaţiile (2.51) şi (2.53) cu

$$(2.55)\quad \langle\varphi|\psi\rangle=\int d\alpha\langle\varphi|\alpha\rangle\langle\alpha|\psi\rangle=\int d\alpha\, d^*(\alpha)c(\alpha)$$

şi respectiv

$$(2.56)\quad \begin{aligned}\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle&=\int d\alpha\, d\beta\langle\varphi|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta|\psi\rangle=\\ &=\int d\alpha\, d\beta\, d^*(\alpha)A(\alpha,\beta)c(\beta).\end{aligned}$$

(ii) *Observabile ca matrici*

Am văzut în cadrul formalismului ondulatoriu al mecanicii cuantice, că observabilelor le corespund operatori autoadjuncţi. Acestea se obţin prin exprimarea necuantică a mărimii fizice respective în funcţia de coordonate şi impulsuri, care pe urmă se înlocuiesc cu operatorii corespunzători. In cazul coordonatei, aceasta este concepută ca un operator de înmulţire cu valoarea sa. In principiu, aceasta este calea şi în mecanica matricială, operatorii fiind în înlocuiţi cu matricile corespunzătoare unei anumite reprezentări.

Prima întrebare este următoarea : cum ataşăm matrici

BCU "I.C. BRĂTIANU" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

observabilelor de bază, adică coordonatelor q_k şi impulsurilor p_j ? Natural, aceste matrici trebuie să fie autoadjuncte, adică

(2.57) $(q_k)^+=(q_k)$ şi $(p_j)^+=(p_j)$

şi să satisfacă relaţia (V.6.41) care, în formă matricială devine

$$[(p_j),(q_k)]=\frac{\hbar}{i}\delta_{jk}I$$

(2.58) $$[(q_j),(q_k)]=0$$

$$[(p_j),(p_k)]=0,$$

I fiind matricea unitate.

Dacă pentru noi, după calea parcursă până aici, relaţia (2.58) este o consecinţă firească, în lucrarea sa de bază, W. Heisenberg a impus-o ca fiind relaţia fundamentală a Mecanicii Matriciale. Acum devine clar că unei observabile A, exprimată în funcţie de coordonate şi impulsuri, îi corespunde o matrice autoadjunctă

(2.59) $(A)^+=(A)$,

sau

(2.60) $A^*_{ik}=A_{ki}$,

obţinută prin înlocuirea coordonatelor q_k şi impulsurilor p_j cu matricile corespunzătoare (q_k) şi (p_j), alese astfel încât să satisfacă relaţiile (2.57) şi (2.58).

A doua întrebare la care trebuie să găsim răspuns este legată de modul în care se obţin valorile proprii ale unei observabile. Să ne întoarcem la relaţia (2.33), care exprimă legătura dintre mecanica ondulatorie şi cea matricială, şi să presupunem că baza aleasă este formată tocmai din vectorii proprii ai observabilei $\hat{A}$ în cauză, deci

(2.61) $\hat{A}|k>=A_k|k>$.

In acest caz, relaţia (2.33) devine

(2.62) $A_{ik}=<i|\hat{A}|k>=A_k\delta_{ik}$,

deci (A) este o matrice diagonală, elementele din afara diagonalei fiind nule. Astfel, pentru a găsi valorile proprii ale observabilei A în mecanica matricială, trebuie să exprimăm matricile (q_k) şi (p_j) astfel ca (A) să fie diagonală şi atunci, elementele pe diagonală vor fi valorile proprii ale lui A. Condiţia (2.60) asigură ca valorile proprii să fie reale, întrucât pentru elementele diagonale avem

(2.63) $A^*_{ii}=A_{ii}$.

Asupra modalităţii de diagonalizare a matricii (A) vom reveni, pe larg, în paragraful următor dedicat schimbării reprezentărilor în spaţiul stărilor.

Relaţiile (2.60) şi (2.63) ce caracterizează matricile autoadjuncte se pot transcrie, pentru cazul în care matricea (A) este exprimată în baza $\{|\alpha>\}$, sub forma

(2.64) $A^*(\alpha,\alpha')=A(\alpha',\alpha)$

şi respectiv

(2.65) $A^*(\alpha,\alpha)=A(\alpha,\alpha)$

pentru elementele "diagonale", adică având abscisa egală cu ordonata.

(iii) <u>*Derivarea matricilor*</u>

Fie $\hat{A}(\alpha)$ un operator dependent de variabila α şi căruia îi asociem matricea (A) cu elementele $A_{ij}(\alpha)$ date de relaţia (2.33). Definem <u>derivata matricei</u> (A) în raport cu α prin relaţia uzuală

(2.66) $$\frac{dA}{d\alpha}=\lim_{\Delta\alpha\to 0}\frac{A(\alpha+\Delta\alpha)-A(\alpha)}{\Delta\alpha},$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

elementele sale fiind

$$(2.67)\quad \langle i|\frac{d\hat{A}}{d\alpha}|j\rangle = \frac{d}{d\alpha}\langle i|\hat{A}|j\rangle = \frac{d}{d\alpha}A_{ij}.$$

Deci, derivata totală a unei matrici în raport cu o variabilă se obţine derivând total fiecare din elementele sale în raport cu variabila respectivă.

Pentru suma şi produsul a două matrici regulile de derivare sunt cele obişnuite, cu respectarea ordinii de scriere a matricilor în interiorul produsului. Astfel, derivata sumei se obţine din (2.34) ca fiind

$$\frac{d\hat{S}}{d\alpha} = \frac{d\hat{A}}{d\alpha} + \frac{d\hat{B}}{d\alpha},$$

deci

$$(2.68)\quad \langle i|\frac{d\hat{S}}{d\alpha}|k\rangle = \frac{d}{d\alpha}A_{ik} + \frac{d}{d\alpha}B_{ik},$$

iar derivata produsului din (2.36) este

$$\frac{d\hat{P}}{d\alpha} = \hat{A}\frac{d\hat{B}}{d\alpha} + \frac{d\hat{A}}{d\alpha}\hat{B},$$

adică

$$(2.69)\quad \begin{aligned}\langle i|\frac{d\hat{P}}{d\alpha}|k\rangle &= \langle i|\frac{d}{d\alpha}(\hat{A}\hat{B})|k\rangle = \sum_j \frac{d}{d\alpha}(A_{ij}B_{jk}) \\ &= \sum_j \left(A_{ij}\frac{dB_{jk}}{d\alpha} + \frac{dA_{ij}}{d\alpha}B_{jk}\right),\end{aligned}$$

relaţiile (2.68) şi (2.69) exprimând elementele matricilor $\frac{d}{d\alpha}(A+B)$ şi $\frac{d}{d\alpha}(AB)$.

O aplicaţie importantă a regulilor de derivare a sumei şi produsului de matrici este derivarea matricei asociate operatorului

unitar $\hat{U}=e^{i\alpha A}$. Acesta a fost introdus prin (V.6.45) şi, prin teorema lui Stone, i s-a asociat operatorul autoadjunct $\hat{A}$, care generează o algebră Lie uniparametrică ce se obţine din (V.6.13) ca fiind

$$(2.70)\quad \hat{A}=-i\frac{d\hat{U}}{d\alpha}\Big|_{\alpha=0}.$$

Asociem operatorilor $\hat{U}$ şi $\hat{A}$ matrici, exprimăm exponenţiala ca o dezvoltare în serie după puterile lui A

$$(2.71)\quad (U)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha A)^n}{n!}$$

şi, derivând termen cu termen membrul drept al lui (2.71), obţinem

$$(2.72)\quad \frac{d}{d\alpha}(U)=i\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(i\alpha A)^{n-1}}{(n-1)!}A,$$

relaţie ce ne permite verificarea imediată a lui (2.70).

In cazul în care matricile (U) formează reprezentarea unui grup Lie n-parametric, adică sunt de forma $U=e^{i\alpha^j A_j}$, atunci matricile asociate celor n operatori $\{A_j\}$ se obţin din

$$(2.73)\quad (A_j)=-i\frac{d}{d\alpha^j}(U)\Big|_{\alpha^1=\alpha^2=\ldots=\alpha^j=0},$$

unde trebuie să ţinem cont de faptul că (A_j) nu comută între ele. După cum am văzut în paragraful 6 al capitolul precedent, $\{A_j\}$ generează o algebră Lie n-dimensională asociată grupului Lie n-parametric. Vom arăta în continuare că produsul a două elemente din grup ne permite o introducere naturală a operaţiei interne în g, numită comutator. Pentru aceasta considerăm cazul unui grup n-parametric cu elementele de forma

(2.74) $U = e^{i\alpha^j A_j} = e^{iX}$,

unde X este un element al spaţiului liniar g, exprimat ca o combinaţie liniară de generatorii $\{A_j\}_{j=\overline{1,n}}$. Efectuând produsul a două elemente din grup obţinem relaţia

(2.75) $U = e^{iX} \cdot e^{iY} = e^{i(X+Y)} \cdot e^{-\frac{1}{2}[X,Y]}$,

numită *formula lui Glauber*. Se presupune că X şi Y comută cu $[X,Y]$.

Demonstraţie. Presupunem că matricea U este o funcţie de variabilă reală t de forma

(2.76) $U(t) = e^{iXt} \cdot e^{iYt}$

şi calculăm derivata

(2.77) $\frac{dU}{dt} = iXe^{iXt}e^{iYt} + e^{iXt}iYe^{iYt}$.

In cel de-al doilea termen din membrul drept vom utiliza relaţia

$$[e^{iXt}, iY] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!}[X^n, iY] = -i\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!}[Y, X^n] =$$

$$= -i\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} n[X,Y]X^{n-1} = -t[X,Y]e^{iXt},$$

unde am folosit relaţia (V.6.25.e). Astfel, obţinem pentru derivata matricei U expresia

(2.78) $\frac{dU}{dt} = i(X+Y)U - t[X,Y]U$,

pe care, integrând-o în raport cu t, o aducem la forma

(2.79) $U(t) = U(0)e^{it(X+Y)U - \frac{1}{2}t^2[X,Y]U}$,

unde $U(0)$ este matricea unitate.

Luând în (2.79) $t=1$, rezultă relaţia (2.75). (q.e.d.)

(iv) *Ecuaţiile canonice ale lui Hamilton*

In capitolul anterior am definit derivata totală în raport cu timpul a unui operator $\hat{A}$ ca fiind

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}],$$

de unde putem obţine acum definiţia derivatei totale în raport cu timpul a unei matrici

$$\frac{d}{dt}(A)=\frac{\partial}{\partial t}(A)+\frac{i}{\hbar}[(H),(A)]. \tag{2.80}$$

Vom arăta, în continuare, că pentru observabile care sunt funcţii întregi de p şi q (deci se constituie exclusiv din p şi q prin operaţii de adunare, înmulţire şi multiplicare cu scalari), sunt adevărate relaţiile:

$$\text{a)}\qquad \frac{\partial(A)}{\partial(q)}=\frac{i}{\hbar}[(p),(A)] \tag{2.81}$$

$$\text{b)}\qquad \frac{\partial(A)}{\partial(p)}=\frac{i}{\hbar}[(A),(q)].$$

Demonstraţie. Vom folosi o metodă analoagă cu cea a inducţiei complete.

1) Relaţia a) este adevărată dacă $(A)=(q)$, sau $(A)=(p)$, căci pentru cele două cazuri avem

$$\frac{\partial(q)}{\partial(q)}=\frac{i}{\hbar}[(p),(q)] \Rightarrow 1=1$$

şi

$$\frac{\partial(p)}{\partial(q)}=\frac{i}{\hbar}[(p),(p)] \Rightarrow 0=0.$$

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2) Din ipoteza că relaţia a) este adevărată pentru matricile (A) şi (B), vom arăta că ea este valabilă şi pentru operatorii

$$(S)=(A)+(B)$$

şi

$$(P)=(A)(B).$$

Intr-adevăr, avem

$$\frac{\partial(S)}{\partial(q)}=\frac{\partial(A)}{\partial(q)}+\frac{\partial(B)}{\partial(q)}=\frac{i}{\hbar}\{[(p),(A)]+[(p),(B)]\}=$$

$$=\frac{i}{\hbar}[(p),(A)+(B)]=\frac{i}{\hbar}[(p),(S)]$$

şi

$$\frac{\partial(P)}{\partial(q)}=\frac{\partial(A)}{\partial(q)}(B)+(A)\frac{\partial(B)}{\partial(q)}=$$

$$=\frac{i}{\hbar}\{[(p),(A)](B)+(A)[(p),(B)]\}=$$

$$=\frac{i}{\hbar}[(p),(A)(B)]=\frac{i}{\hbar}[(p),(P)].$$

3) Inmulţirea cu scalari este fără probleme, căci scalarii pot fi scoşi atât în faţa operatorului de derivare, cât şi a parantezei pătratice care indică comutatorul.

Din 1), 2) şi 3) rezultă că (2.81.a) este adevărată pentru orice funcţie întreagă de (p) şi (q).

Demonstraţie relaţiei (2.81.b) este cu totul analoagă.

O consecinţă deosebit de interesantă a relaţiilor (2.81) se obţine din cazul particular în care (A) coincide cu hamiltonianul (H) al sistemului. Atunci, relaţiile (2.81) devin:

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITY LIBRARY

(2.82)

a) $$\frac{\partial(H)}{\partial(q)}=\frac{i}{\hbar}[(p),(H)]$$

b) $$\frac{\partial(H)}{\partial(p)}=\frac{i}{\hbar}[(H),(q)].$$

Punem acum în (2.80), pe rând, $(A)=(p)$ şi $(A)=(q)$ şi obţinem ecuaţiile:

(2.83)

a) $$(\dot{p})=\frac{i}{\hbar}[(H),(p)]$$

b) $$(\dot{q})=\frac{i}{\hbar}[(H),(q)],$$

care, prin comparaţie cu (2.82), ne conduc la ecuaţiile canonice ale lui Hamilton:

(2.84)

a) $$(\dot{p})=-\frac{\partial(H)}{\partial(q)}$$

b) $$(\dot{q})=\frac{\partial(H)}{\partial(p)}.$$

(v) *Oscilatorul liniar armonic*

Să exemplificăm metoda matricială pentru oscilatorul liniar armonic descris de hamiltonianul [26]

(2.85) $$(H)=\frac{1}{2\mu}(p)^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2(q)^2,$$

unde (p) şi (q) sunt matricile ataşate observabilelor impuls şi coordonată. Matricile (p) şi (q) fiind autoadjuncte, este clar că şi observabilei H îi corespunde o matrice autoadjunctă

(2.86) $$(H)^+=(H).$$

Nu vom specifica de la bun început forma concretă a matricilor (p) şi (q). Ele vor fi determinate astfel încât (H) să fie diagonală, de forma

$$(H)=\begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & E_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \tag{2.87}$$

elementele $E_0, E_1, E_2, \dots$ fiind valorile proprii ale observabilei H.

Pentru explicitatea relaţiilor (2.82), să calculăm mai întâi derivatele $\frac{\partial(H)}{\partial(q)}$ şi $\frac{\partial(H)}{\partial(p)}$. Din (2.85) avem

$$\frac{\partial(H)}{\partial(q)}=\mu\omega^2(q)\ ;\ \frac{\partial(H)}{\partial(p)}=\frac{1}{\mu}(p). \tag{2.88}$$

Pe de altă parte, pentru elementul cu indicii i şi k al comutatorului lui (H), dat de (2.87), cu (q) rezultă

$$[(H),(q)]_{ik}=\sum_j\left(H_{ij}q_{jk}-q_{ij}H_{jk}\right)=\left(E_i-E_k\right)q_{ik} \tag{2.89}$$

şi, în mod analog,

$$[(p),(H)]_{ik}=\sum_j\left(p_{ij}H_{jk}-H_{ij}p_{jk}\right)=-\left(E_i-E_k\right)p_{ik}. \tag{2.90}$$

Utilizând (2.88), (2.89), (2.90) în (2.82) obţinem relaţiile:

$$\text{a)}\quad \mu\omega^2 q_{ik}=-\frac{i}{\hbar}\left(E_i-E_k\right)p_{ik}$$

$$\text{b)}\quad \frac{1}{\mu}p_{ik}=\frac{i}{\hbar}\left(E_i-E_k\right)q_{ik}, \tag{2.91}$$

de unde, prin eliminarea lui p_{ik}, rezultă

$$\left[\left(E_i-E_k\right)^2-(\hbar\omega)^2\right]q_{ik}=0, \tag{2.92}$$

deci

(2.93) sau $E_i - E_k = \pm\hbar\omega$ sau $q_{ik} = 0$.

Să presupunem

(2.94) $E_0 < E_1 < E_2 < \ldots$.

Atunci, (2.93) implică

(2.95) $E_i - E_{i-1} = \hbar\omega$ $(i = 1,2,\ldots)$ deci $E_n = E_0 + n\hbar\omega$

şi

(2.96) $q_{i,i-1} \neq 0$; $q_{i-1,i} \neq 0$, în rest $q_{ik} = 0$.

Din (2.91), (2.95), (2.96) rezultă că singurele elemente diferite de zero ale lui p_{ik} sunt

(2.97) $p_{i,i-1} = i\mu\omega q_{i,i-1}$ şi $p_{i-1,i} = -i\mu\omega q_{i-1,i}$.

Acum suntem în măsură să cerem satisfacerea relaţiei de comutare (2.58), adică

(2.98) $[(p),(q)]_{ik} = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}$,

în care singurele cazuri interesante pot fi cele pentru care $k = i$ sau $k = i \pm 2$, în rest (2.98) reducându-se la relaţia banală $0 = 0$. Pentru $k = i+2$ (2.98) devine

(2.99) $p_{i,i+1}q_{i+1,i+2} - q_{i,i+1}p_{i+1,i+2} = 0$,

a cărei valabilitate se stabileşte utilizând (2.97) şi nu ne dă nici o condiţie în plus. La fel se întâmplă şi pentru cazul în care $k = i-2$. Punem acum în (2.98) $k = i$ şi avem

(2.100) $$p_{i,i-1}q_{i-1,i} + p_{i,i+1}q_{i+1,i} - q_{i,i-1}p_{i-1,i} - q_{i,i+1}p_{i+1,i} = \frac{\hbar}{i},$$

sau, utilizând (2.97),

(2.101) $$i\mu\omega\left(q_{i,i-1}q_{i-1,i} - q_{i,i+1}q_{i+1,i} + q_{i,i-1}q_{i-1,i} - q_{i,i+1}q_{i+1,i}\right) = \frac{\hbar}{i}$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în care impunem condiţia (2.60) pentru matricea autoadjunctă (q) şi obţinem

$$|q_{i+1,i}|^2 - |q_{i,i-1}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega}. \tag{2.102}$$

Cum cea mai mică valoare a indicelui este 0 (vezi (2.87)), de aici rezultă $|q_{10}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega}$ şi în general

$$|q_{n,n-1}|^2 = n\frac{\hbar}{2\mu\omega},\ n \in \mathbb{N}^*. \tag{2.103}$$

Neavând altă condiţie, vom alege matricea (q) ca o matrice cu elemente reale, având singurele elemente nenule de forma

$$q_{n,n-1} = q_{n-1,n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\sqrt{n}. \tag{2.104}$$

In concordanţă cu (2.97), elementele diferite de zero ale matricei (p) vor fi

$$p_{n,n-1} = -p_{n-1,n} = i\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}\sqrt{n}. \tag{2.105}$$

Din (2.104) şi (2.105) obţinem forma concretă a matricilor (q) şi (p) ca fiind

$$(q) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \tag{2.106}$$

şi respectiv

$$(2.107)\qquad (p)=i\sqrt{\frac{\mu\omega\hbar}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0\ldots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0\ldots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3}\ldots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\ldots \\ \ldots\ldots & & & \end{pmatrix},$$

conducând la matricea diagonală asociată hamiltonianului oscilatorului liniar armonic

$$(2.108)\qquad (H)=\frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0\ldots \\ 0 & 3 & 0 & 0\ldots \\ 0 & 0 & 5 & 0\ldots \\ 0 & 0 & 0 & 7\ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix},$$

care trebuie să coincidă cu (2.87). Rezultă, deci, pentru valorile proprii ale operatorului $\hat{H}$, relaţia de cuantificare

$$(2.109)\qquad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$

al cărui rol în dezvoltarea Mecanicii Cuantice l-am comentat deja şi care pune în evidenţă, pentru $n=0$, o proprietate eminamente cuantică, inaccesibilă vechii teorii a cuantelor, anume existenţa şi valoarea exactă a energiei de zero a oscilatorului liniar armonic.

VI.3. Schimbarea reprezentărilor în spaţiul stărilor

Unui operator liniar îi putem asocia, într-o bază dată, o matrice pătratică ale cărei elemente sunt definite prin relaţia (2.33). In mod analog, unui vector ket (bra) îi corespunde o matrice unicolonară

(unilinie), componentele sale fiind chiar proiecţiile vectorilor bazei pe vectorul ket (bra) respectiv. Evident, schimbarea reprezentării conduce la obţinerea unor noi matrici corespunzătoare operatorilor, sau vectorilor ket şi bra. In acest paragraf, ne propunem să studiem problema transformării elementelor matriciale ale operatorilor şi a componentelor vectorilor ket şi bra în cazul schimbării bazei ortonormale, precum şi modalitatea de diagonalizare a matricilor corespunzătoare operatorilor liniari. Deoarece matricea care realizează trecerea de la o bază ortonormală discretă la o altă bază ortonormală este unitară, în încheierea acestui paragraf vom insista asupra operatorilor unitari, ca reprezentări ale grupurilor Lie n -dimensionale definite în paragraful 6 al capitolului precedent.

A. TRANSFORMAREA ELEMENTELOR MATRICIALE ALE OPERATORILOR PE $\mathscr{E}$

Fie $\{|i>\}$ o bază în spaţiul vectorilor de stare $\mathscr{E}$. Ataşăm operatorului $\hat{A}$ matricea (A) cu elementele (2.33). Să considerăm acum o a doua bază în $\mathscr{E}$, notată cu $\{|v'>\}$. Operatorul $\hat{A}$ poate fi reprezentat matricial şi în această bază, obţinându-se o matrice (A'), diferită de (A), ale cărei elemente sunt

(3.1) $A'_{v'w'}=<v'|\hat{A}|w'>$.

Pentru a găsi legătura dintre (A') şi (A), vom scrie (3.1) sub forma

(3.2) $A'_{v'w'}=\sum_i \sum_k <v'|i><i|\hat{A}|k><k|w'>$.

Notând cu (S) matricea cu elementele

(3.3) $S_{kw'}=<k|w'>$, deci $S^{+}_{v'i}=<i|v'>^{*}=<v'|i>$,

putem scrie relaţia (3.2) ca fiind

(3.4) $A'_{v'w'}=\sum_i\sum_k S^{+}_{v'i}A_{ik}S_{kw'}$,

adică

(3.5) $(A')=(S)^{+}(A)(S)$.

Relaţia (3.2) ne permite să arătăm că trasa matricei (A), definită ca suma elementelor de pe diagonală, este invariantă la schimbarea bazei ortonormale. Intr-adevăr, scriind (3.2) sub forma

(3.6) $A'_{v'w'}=\sum_i\sum_j <j|w'><v'|i><i|\hat{A}|j>$,

şi sumând elementele de pe diagonala lui (A') obţinem

(3.7) $$\sum_{v'}A'_{v'v'}=\sum_i\sum_j\sum_{v'}<j|v'><v'|i><i|\hat{A}|j>=$$
$$=\sum_i\sum_j<j|i><i|\hat{A}|j>=\sum_j<j|\hat{A}|j>=\sum_j A_{jj}.$$

Pentru produsul mai jmultor matrici, trasa prezintă următoarele proprietăţi:

(3.8) (i) $TrAB=TrBA$

(ii) $TrABC=TrCAB=TrBCA$

(iii) $Tr[A,B]=0$.

Demonstraţie. Prin utilizarea relaţiei de închidere (2.5), egalitatea (i) rezultă imediat astfel:

BCU IASI CENTRALA UNIVERSITARA

$$TrAB = \sum_i (AB)_{ii} = \sum_i \langle i|\hat{A}\hat{B}|i\rangle =$$

$$= \sum_i \sum_j \langle i|\hat{A}j\rangle\langle j|\hat{B}|i\rangle =$$

$$= \sum_i \sum_j \langle j|\hat{B}|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle = \tag{3.9}$$

$$= \sum_j \langle j|\hat{B}\hat{A}|j\rangle = \sum_j (BA)_{jj} = TrBA.$$

In (ii) utilizăm faptul că numerele complexe pot fi scrise în orice ordine, fără a afecta rezultatul final şi obţinem

$$TrABC = \sum_i \langle i|\hat{A}\hat{B}\hat{C}|i\rangle =$$

$$= \sum_i \sum_j \sum_k \langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle\langle k|\hat{C}|i\rangle =$$

$$= \sum_i \sum_j \sum_k \langle k|\hat{C}|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle = \tag{3.10}$$

$$= \sum_j \sum_k \langle k|\hat{C}\hat{A}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle =$$

$$= \sum_k \langle k|\hat{C}\hat{A}\hat{B}|k\rangle = TrCAB.$$

Relaţia (iii) este o consecinţă imediată a lui (i). (q.e.d.)

Matricea (S) cu elementele (3.3) realizează trecerea de la o bază ortonormală la alta. Intr-adevăr, pentru vectorii ket ai celor două baze avem relaţiile:

$$\text{(i)} \quad |v'\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|v'\rangle = \sum_i |i\rangle S_{iv'} \tag{3.11}$$

$$\text{(ii)} \quad |i\rangle = \sum_{v'} |v'\rangle\langle v'|i\rangle = \sum_{v'} |v'\rangle S^+_{v'i},$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

iar pentru vectorii bra rezultă conjugatele hermitice ale acestora, adică

$$\text{(i)} \qquad \langle v'| = \sum_i \langle v'|i\rangle\langle i| = \sum_i S^+_{v'i}\langle i| \tag{3.12}$$

$$\text{(ii)} \qquad \langle i| = \sum_{v'} \langle i|v'\rangle\langle v'| = \sum_i S_{iv'}\langle v'| \,.$$

Din condiţia ca ambele baze să fie ortonormale, adică să satisfacă (2.3), rezultă următoarea proprietate importantă pentru matricea S de schimbare a bazelor. Astfel, relaţia

$$\delta_{v'w'} = \langle v'|w'\rangle = \sum_i \sum_k \langle v'|i\rangle\langle i|k\rangle\langle k|w'\rangle = \tag{3.13}$$

$$= \sum_i \langle v'|i\rangle\langle i|w'\rangle = \sum_i S^+_{v'i} S_{iw'}$$

impune ca matricea (S) să fie unitară, adică

$$(S)^+(S) = (I) \text{ sau } (S)^+ = (S)^{-1}, \tag{3.14}$$

motiv pentru care, în cele ce urmează, vom nota matricea S cu U.

In încheiere, să revenim asupra relaţiei (2.32), referitoare la proiectori, obţinută în paragraful anterior şi să o transcriem sub forma

$$\langle i|\hat{A}_m|j\rangle = \langle i|_m \hat{A}|j\rangle_m, \tag{3.15}$$

unde $|i\rangle_m$ şi $|j\rangle_m$ sunt vectori al bazei spaţiului $\mathscr{E}_m$. Observăm că prin restricţia $\hat{A}_m$ a unui operator $\hat{A}$ la subspaţiul $\mathscr{E}_m$, subîntins de baza ortonormală $|1\rangle,\ldots|i\rangle,\ldots|m\rangle$, am obţinut o matrice pătratică $m \times m$, restul elementelor matricei (A), corespunzătoare lui $i>m$ sau $j>m$ fiind nule.

B. DIAGONALIZAREA MATRICILOR

Dintre transformările care se pot efectua asupra matricei (A) asociată operatorului $\hat{A}$, un interes deosebit îl prezintă cea care transformă pe (A) într-o matrice diagonală (A'), a cărei elemente diagonale reprezintă, după cum vom vedea în paragraful următor, valorile proprii ale observabilei A.

Diagonalizarea matricei (A) se face prin găsirea unei matrici unitare (U), care, prin transformarea

(3.16) $(A')=(U)^{+}(A)(U)$,

să conducă la o matrice diagonală. Pentru a vedea calea care ne conduce la găsirea lui (U), înmulţim (3.16) din stânga cu (U), ceea ce ne dă

(3.17) $(U)(A')=(A)(U)$,

sau, pe componente,

(3.18) $$\sum_k U_{ik}A'_{kj}=\sum_k A_{ik}U_{kj}$$

şi impunem ca (A') să fie diagonală. Relaţia (3.18) devine

(3.19) $$\sum_k A_{ik}U_{kj}-U_{ij}A'_{jj}=0,$$

sau

(3.20) $$\sum_k \left(A_{ik}-\delta_{ik}A'_{jj}\right)U_{kj}=0.$$

Acesta este un sistem liniar şi omogen, pentru necunoscutele U_{kj}, care are numai atunci soluţii nebanale dacă

(3.21) $\det\left(A_{ik}-\delta_{ik}A'_{ij}\right)=0$.

Soluţiile acestei ecuaţii pentru necunoscutele A'_{jj} ne furnizează elementele diagonale ale matricei (A'). Notând aceste soluţii, pentru $j=1,2,...$ cu

(3.22) $A'_{11}=A'_1$; $A'_{22}=A'_2$; *etc.*

rezultă expresia matricei diagonale

(3.23) $(A')=\begin{pmatrix} A'_1 & 0 & \dots \\ 0 & A'_2 & \dots \\ \dots & \dots & \end{pmatrix}$.

Pentru soluţiile A'_1, A'_2 *etc.*, (3.20) se concretizează sub forma

(3.24) $\begin{cases} \sum_k \left(A_{ik}-\delta_{ik}A'_1\right)U_{k1}=0 \\ \sum_k \left(A_{ik}-\delta_{ik}A'_2\right)U_{k2}=0 \\ \dots\dots\dots \end{cases}$

unde fiecare sumă este un sistem liniar şi omogen de ecuaţii (deoarece $i=1,2,...$) pentru o coloană $(U_{k1}, U_{k2},...)$ a matricei (U). Constantele arbitrare ce apar la soluţiile nebanale ale acestor sisteme liniare şi omogene de ecuaţii, asigură posibilitatea satisfacerii relaţiei de unitaritate (3.14).

Matricea U astfel determinată realizează trecerea între bazele ortonormale $\{|i>\}$ şi $\{|\nu'>\}$ prin relaţiile (3.11) pe care le putem scrie sub forma

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(i) \qquad |\nu'> = \sum_i U_{i\nu'} |i> \tag{3.25}$$

$$(ii) \qquad |i> = \sum_{\nu'} U^+_{\nu' i} |\nu'>,$$

de unde, prin conjugare hermitică, avem

$$(i) \qquad <\nu'| = \sum_i U^+_{\nu' i} <i| \tag{3.26}$$

$$(ii) \qquad <i| = \sum_{\nu'} U_{i\nu'} <\nu'|.$$

Considerăm acum un vector ket $|\psi>$ căruia îi asociem o matrice unicolonară (ψ) de forma (2.45). Sub acţiunea operatorului unitar $\hat{U}$, acesta se transformă după relaţia matricială

$$(\psi') = (U)^+ (\psi). \tag{3.27}$$

Intr-adevăr, scriind (3.27) pe componente şi utilizând (3.25) şi (2.45), rezultă

$$\psi'_{\nu'} = \sum_j U^+_{\nu' j} \psi_j = \sum_j <\nu'|j><j|\psi> = <\nu'|\psi>, \tag{3.28}$$

deci matricea unicolonară (ψ') cuprinde componentele vectorului transformat în noua bază ortonormală.

Conjugând hermitic relaţia (3.27), obţinem transformata matricei unilinie asociate unui vector bra

$$(\varphi') = (\varphi)(U), \tag{3.29}$$

care se verifică imediat, prin explicitare pe componente, astfel

$$\varphi'_{\nu'} = \sum_j \varphi_j U_{j\nu'} = \sum_j <\varphi|j><j|\nu'> = <\varphi|\nu'>. \tag{3.30}$$

Relaţiile (3.27) şi (3.29) ne permit să demonstrăm că transformările asociate operatorilor unitari $\hat{U}$, reprezentaţi prin matrici unitare (U),

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

conservă produsul scalar, adică

(3.31) $<\varphi|\psi>=<\varphi|\hat{U}\hat{U}^{+}|\psi>=<\varphi'|\psi'>$.

Afirmaţia rămâne valabilă şi dacă intercalăm un operator $\hat{A}$ în interiorul produsului scalar, deoarece, ţinând cont de (3.16), avem

(3.32) $<\varphi|\hat{A}|\psi>=<\varphi|\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{+}|\psi>=<\varphi'|\hat{A}'|\psi'>$.

Exemplu. Fie $\mathscr{E}_2$ spaţiul bidimensional al stărilor subîntins de baza ortonormală $\{|i>\}=\{|1>,|2>\}$. Un vector ket $|\psi>\in\mathscr{E}_2$ se scrie ca o combinaţie liniară de vectorii bazei, ceea ce matricial se exprimă prin

(3.33) $(\psi)=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\psi_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\psi_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$,

componentele $\psi_i(i=\overline{1,2})$ fiind date de relaţiile

(3.34) $\psi_1=<1|\psi>\ ;\ \psi_2=<2|\psi>$,

unde $|\psi>=\psi_1|1>+\psi_2|2>$.

Să considerăm pentru început cazul unui sistem descris de hamiltonianul exprimat prin matricea autoadjunctă reală

(3.35) $(H)=\begin{pmatrix}H_0 & H_{12}\\ H_{21} & H_0\end{pmatrix}$ cu $H_{12}=H_{21}^{*}=\chi$.

Problema diagonalizării acestei matrici se reduce practic la cea a găsirii matricei unitare (U), care, prin transformarea (3.5), să aducă pe (H) la forma diagonală (H'). Matricea (U) de forma

(3.36) $(U)=\begin{pmatrix}\alpha & \beta\\ \rho & \eta\end{pmatrix}$ cu $\det U=1$,

are ca inversă pe

(3.37) $(U)^{-1} = \begin{pmatrix} \eta & -\beta \\ -\rho & \alpha \end{pmatrix}$,

care, conform relaţiei (3.14), trebuie să coincidă cu

(3.38) $(U)^{+} = \begin{pmatrix} \alpha^* & \rho^* \\ \beta^* & \eta^* \end{pmatrix}$.

Obţinem deci forma generală a matricei (U)

(3.39) $(U) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}$ cu $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$,

care ne sugerează o alegere de tipul

(3.40) $(U) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$.

Determinarea fazei φ se face prin impunerea condiţiei (3.16), adică

(3.41) $$\begin{pmatrix} H_1' & 0 \\ 0 & H_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_0 & \chi \\ \chi & H_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix},$$

respectiv

$$\begin{pmatrix} H_1' & 0 \\ 0 & H_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_0 - \chi\sin 2\varphi & \chi\cos 2\varphi \\ \chi\cos 2\varphi & H_0 + \chi\sin 2\varphi \end{pmatrix}.$$

Cele două valori posibile ale lui φ, pentru care $\cos 2\varphi = 0$,

(3.42) $\varphi_1 = +\frac{\pi}{4}$; $\varphi_2 = -\frac{\pi}{4}$

le corespund matricile unitare

BCU ASE CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(U)_1=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{pmatrix}$$

(3.43)

$$(U)_2=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

conducând la matricile diagonale (echivalente în sensul ordonării valorilor proprii)

$$(H')_1=\begin{pmatrix}H_0-\chi & 0\\ 0 & H_0+\chi\end{pmatrix}$$

(3.44)

$$(H')_2=\begin{pmatrix}H_0+\chi & 0\\ 0 & H_0-\chi\end{pmatrix}.$$

Pentru a obține expresiile transformate ale vectorului ket (3.33), să aplicăm relația (3.27), utilizând, de exemplu, matricea $(U)_2$, corespunzătoare diagonalizării lui (H) la $(H')_1$.

Obținem astfel

(3.45) $$(\psi')=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}\psi_1-\psi_2\\ \psi_1+\psi_2\end{pmatrix};\ \varphi_1=\frac{\pi}{4}.$$

Relația (3.45), fiind valabilă oricare ar fi vectorul $|\psi>\in\mathscr{E}_2$, conduce în particular la determinarea componentelor ψ_1,ψ_2 ale vectorilor proprii ai operatorului $\hat{H}$ prin impunerea condiției ca vectorii $|\psi'>$ să fie vectori proprii al lui (H'), adică

(3.46) $$(H')(\psi')=\lambda(\psi').$$

Pentru $\lambda_1=H_0-\chi$, obținem

(3.47) $$\begin{pmatrix} H_0-\chi & 0 \\ 0 & H_0+\chi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1-\psi_2 \\ \psi_1+\psi_2 \end{pmatrix} = (H_0-\chi)\begin{pmatrix} \psi_1-\psi_2 \\ \psi_1+\psi_2 \end{pmatrix}$$

de unde rezultă $\psi_2=-\psi_1$ şi astfel, primul vector propriu "ordonat" al lui (H) este

(3.48) $$(\psi)_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Deoarece (H') este diagonal, cei doi vectori proprii normaţi ai lui $\hat{H}'$ pot fi aleşi ca fiind chiar vectorii $|1>, |2>$ ai bazei ortonormale (canonice) din $\mathscr{E}_2$ şi astfel, în raport cu aceştia, vectorii proprii $|\psi_1>, |\psi_2>$ ai operatorului (H) se vor reprezenta prin relaţiile

(3.49) $$|\psi_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|1>-|2>)$$

(3.50) $$|\psi_2>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|1>+|2>).$$

După cum se observă, cei doi vectori proprii ai operatorului autoadjunct $\hat{H}:\mathscr{E}_2\to\mathscr{E}_2$ sunt de simetrie univoc definită în sensul că, la permutarea stărilor $|1>\leftrightarrow|2>$ primul vector devine $-|\psi_1>$, al doilea rămânând neschimbat. Cu alte cuvinte, cele două stări proprii $|1>, |2>$ ale lui $\hat{H}'$ intervin cu pondere egală în stările proprii ale lui $\hat{H}$, determinând antisimetria stării $|\psi_1>$ şi simetria $|\psi_2>$.

Un caz mai general, deosebit de interesant, referitor la legătura cu profunde semnificaţii fizice, dintre autoadjunctivitatea operatorilor asociaţi observabilelor şi univocitatea parităţii funcţiilor proprii ale

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

acestora, este reprezentat de cel al hamiltonianului (3.35), cu $H_{12}^{*} \neq H_{21}$ aflate în relaţia

(3.51) $e^{i\zeta} = \sqrt{\dfrac{H_{21}}{H_{12}}}$ unde $|e^{i\zeta}| \neq 1$, $\zeta \in \mathbb{C}$.

Fără a restrânge generalitatea, definem prin

(3.52) $e^{i\zeta} = \dfrac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}$

factorul ε care se exprimă în funcţie de elementele matricei (H), ca fiind

(3.53) $\varepsilon = \dfrac{\sqrt{H_{12}} - \sqrt{H_{21}}}{\sqrt{H_{12}} + \sqrt{H_{21}}}$.

Pentru diagonalizarea matricei (H) alegem matricea (S) de forma

(3.54) $(S) = \dfrac{1}{\sqrt{2}x} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -e^{i\xi} & e^{i\xi} \end{pmatrix}$

şi avem

$$(H') = (S)^{+}(H)(S) =$$

$$= \frac{1}{2x^2} \begin{pmatrix} 2H_0 - H_{21}e^{-i\xi} - H_{12}e^{i\xi} & -H_{21}e^{-i\xi} + H_{12}e^{i\xi} \\ H_{21}e^{-i\xi} - H_{12}e^{i\xi} & 2H_0 + H_{21}e^{-i\xi} + H_{12}e^{i\xi} \end{pmatrix},$$

de unde rezultă, ţinând cont de (3.51), expresia matricii (H) diagonalizate

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(H')=\begin{pmatrix} H_1' & 0 \\ 0 & H_2' \end{pmatrix}=$$

(3.55)

$$=\frac{1}{x^2}\begin{pmatrix} H_0-\sqrt{H_{12}H_{21}} & 0 \\ 0 & H_0+\sqrt{H_{12}H_{21}} \end{pmatrix}.$$

Procedând în acelaşi mod ca şi în în cazul hamiltonianului (3.35), vom obţine pentru vectorii proprii $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$ ai operatorului (H), în ipoteza (3.51), următoarele expresii

$$\text{(i)} \qquad (\psi)_1=(S)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

(3.56)

$$\text{(ii)} \qquad (\psi)_2=(S)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},$$

adică,

$$(\psi)_1=\frac{1}{\sqrt{2}x}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -e^{i\xi} & e^{i\xi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}x}\begin{pmatrix}1\\-e^{i\xi}\end{pmatrix}$$

$$(\psi)_2=\frac{1}{\sqrt{2}x}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -e^{i\xi} & e^{i\xi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}x}\begin{pmatrix}1\\e^{i\xi}\end{pmatrix}.$$

De aici, impunând condiţia de normare a vectorilor proprii $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$, obţinem:

$$x=\sqrt{\frac{1+|\varepsilon|^2}{(1+\varepsilon)(1+\varepsilon^*)}}$$

şi astfel, în raport cu baza canonică

BCU MS CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$|1\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ ;\ |2\rangle \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

vectorii $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$ capătă expresiile

$$(i) \qquad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\sqrt{\frac{1+\varepsilon^*}{1+\varepsilon}}\left[(1+\varepsilon)|1\rangle - (1-\varepsilon)|2\rangle\right]$$

(3.57)

$$(ii) \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\sqrt{\frac{1+\varepsilon^*}{1+\varepsilon}}\left[(1+\varepsilon)|1\rangle + (1-\varepsilon)|2\rangle\right]$$

care scot în evidenţă următoarele aspecte "neobişnuite":

- Existenţa elementelor nediagonale H_{12} şi H_{21} conduce la amestecul stărilor $|1\rangle$ şi $|2\rangle$;
- Cele două stări proprii $|1\rangle$ şi $|2\rangle$ ale lui $\hat{H}'$ intervin cu ponderi inegale în stările proprii (3.57) ale lui $\hat{H}$, violând simetria definită anterior, în sensul că permutările $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ conduc la obţinerea unor stări noi;
- Stările $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$ nu sunt ortogonale, adică

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{2\,Re\,\varepsilon}{1+|\varepsilon|^2} \neq 0.$$

Exemplul prezentat oferă un model simplu pentru justificarea violării simetriei combinate CP (conjugare de sarcină + paritate) pusă în evidenţă experimental, în 1964 [8], pentrul sistemul K^0-$\overline{K}^0$. Parametrul ε ce caracterizează violarea simetriei CP este foarte mic, fiind determinat de partea imaginară a lui H_{12} şi de diferenţa maselor celor două stări fizice corespunzătoare lui $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$.

C. MATRICI UNITARE

Fie G un grup abstract şi $\mathscr{E}$ un spaţiu liniar, care poate fi, de exemplu, cel al stărilor. O reprezentare asociază fiecărui element $a \in G$, un operator $\hat{T}: \mathscr{E} \to \mathscr{E}$ cu proprietăţile:

(3.58)
$$\text{(i)} \quad \hat{T}(a \cdot b) = \hat{T}(a) \cdot \hat{T}(b)$$
$$\text{(ii)} \quad \hat{T}(e) = \hat{I}, \ e \text{ fiind elementul unitate al lui } G, \text{ iar } \hat{I} \text{ operatorul unitate.}$$

Dacă operatorul $\hat{T}$ este unitar, adică satisface condiţia (V.5.10), atunci reprezentarea se numeşte unitară.

Deoarece teoria generală a operatorilor liniari a fost dezvoltată în paragraful V.5, insistându-se şi asupra proprietăţilor generale ale operatorilor unitari, în cele ce urmează, vom asocia, prin (2.33), operatorilor unitari $\hat{U}$, matrici unitare (U), acţiunea acestora asupra vectorilor $|ket> \in \mathscr{E}$ şi $<bra| \in \mathscr{E}^*$ fiind dată de (3.27) şi (3.29). Prin asocierea de matrici operatorilor liniari, definiţia (3.58) a unei reprezentări coincide cu definiţia V.6.2.

In continuare suntem interesaţi de reprezentările grupurilor Lie. Elementele acestora fiind de forma (V.6.11), le putem asocia operatori de tipul

(3.59) $$\hat{U} = \exp\{i\hat{A}\},$$

care, în ipoteza $\hat{A}^+ = \hat{A}$, verifică relaţia (V.5.10), deci sunt operatori unitari. După cum am arătat în paragraful V.6, dedicat grupurilor şi algebrelor Lie, aplicaţia "exp" face trecerea de la grupul Lie G la

algebra Lie g, deci, operatorul autoadjunct $\hat{A}$ este asociat, într-o reprezentare dată, unui element al spaţiului liniar g şi deci este de forma $\hat{A} = \alpha^j \hat{X}_j$, unde $\{\hat{X}_j\}$ formează o reprezentare a generatorilor lui g.

Scriind elementele grupului Lie sub forma unei dezvoltări în serie (V.6.12), operatorul (3.59) devine

(3.60) $\hat{U} = \hat{I} + i\alpha^j \hat{X}_j$,

unde s-au neglijat puterile superioare ale parametrilor infinitezimali. Evident,

(3.61) $\hat{U}^+ = \hat{I} - i\alpha^j \hat{X}_j^+$,

şi deci relaţia (V.5.10) impune

(3.62) $\hat{X}_j^+ = \hat{X}_j$,

adică, operatorii asociaţi generatorilor algebrei Lie sunt autoadjuncţi.

O transformare (3.16) conduce la operatorul

(3.63) $\hat{A}' = \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} = \hat{A} - i\alpha^j \left[\hat{X}_j, \hat{A}\right]$,

deci variaţia operatorului $\hat{A}$ printr-o transformare infinitezimală depinde liniar de comutatorii $\left[\hat{X}_j, \hat{A}\right]$.

Cele discutate până acum pot fi transcrise în limbaj matricial, operatorii fiind înlocuiţi cu matricile asociate. Deoarece matricile unitare au un rol deosebit, ele putând fi considerate ca reprezentări ale grupurilor Lie cu importante aplicaţii în fizică, în cele ce urmează vom prezenta grupul matricilor unitare, ca subgrup al grupului general liniar n - dimensional.

In cazul transformărilor generale de coordonate

(3.64) $x_i' = A_{ij} x_j$, $i = \overline{1,n}$, $|a_{ij}| \neq 0$,

scrise matricial sub forma

(3.65) $(r') = (A)(r)$ cu $\det(A) \neq 0$,

matricile reale $(A)_{nxn}$ cu $\det(A)\neq 0$ formează grupul general liniar $GL(n,\mathbb{R})$, ale cărui elemente sunt funcţii de n^2 parametri esenţiali. Dacă x_i sunt variabile complexe, atunci numărul parametrilor esenţiali (reali) este $2n^2$. Evident, domeniul de variaţie al parametrilor fiind infinit, grupul nu este compact, iar pentru $n>1$ este neabelian. O teorie generală a grupurilor Lie depăşind cadrul acestui tratat, iar o introducere în acest domeniu fiind subiectului paragrafului 6 al capitolului anterior, în continuare ne vom limita la prezentarea succintă a câtorva subgrupuri ale lui $GL(n,\mathbb{R})(GL(n,\mathbb{C}))$.

Grupul special liniar $SL(n,\mathbb{R})(SL(n,\mathbb{C}))$ conţine elemente $(A)_{nxn}$ din $GL(n,\mathbb{R})(GL(n,\mathbb{C}))$ cu

(3.66) $\det(A)=1$,

condiţie ce reduce numărul parametrilor esenţiali la n^2-1 (respectiv $2n^2-1$).

Grupul ortogonal n-dimensional $O(n,\mathbb{R})(O(n,\mathbb{C}))$ cuprinde elemente ale grupului $GL(n,\mathbb{R})(GL(n,\mathbb{C}))$ care lasă invariantă forma $\sum_{i=1}^{n} x_i^2$, adică "lungimea" vectorilor. In cazul lui $GL(n,\mathbb{R})$ ortogonalitatea matricilor introducând $\frac{n(n+1)}{2}$ condiţii, micşorează numărul parametrilor esenţiali la $\frac{n(n-1)}{2}$.

Grupul unitar n-dimensional $U(n)$ este un subgrup al lui $GL(n,\mathbb{C})$ ale cărei matrici satisfac condiţia (3.14), numărul parametrilor esenţiali fiind $2n^2-n^2=n^2$. Deoarece (3.14) cere ca $\sum_j |A_{ij}|^2=1$, adică

$|A_{ij}|^2 \le 1, (\forall) i,j=\overline{1,n}$, rezultă că, domeniul de variaţie al parametrilor fiind finit, grupul $U(n)$ este compact, proprietate pe care o au, de asemenea, toate subgrupurile sale.

Matricile aparţinând atât lui $U(n)$ cât şi lui $SL(n,\mathbb{C})$ formează, de asemenea, un grup, numit grupul special unitar n -dimensional

(3.67) $SU(n)=U(n)\cap SL(n,\mathbb{C})$,

care este compact, fiind un subgrup al lui $U(n)$ şi ale cărui elemente sunt funcţii de $2n^2-n^2-1=n^2-1$ parametri esenţiali infinitezimali.

Ca un exemplu, să considerăm grupul $SU(2)$ al matricilor complexe speciale unitare bidimensionale, ale căror elemente au forma generală (3.39). Notând cu β_1,β_2,β_3 cei trei parametri esenţiali (reali), matricea $(U)\in SU(2)$ poate fi scrisă astfel

(3.68)
$$(U)=\begin{pmatrix} \beta_0+i\beta_3 & \beta_2+i\beta_1 \\ -\beta_2+i\beta_1 & \beta_0-i\beta_3 \end{pmatrix}=$$
$$=\beta_0(I)_{2x2}+i\beta^j(\sigma_j),\ (I)_{2x2}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

unde

(3.69) $\beta_0^2+\beta_1^2+\beta_2^2+\beta_3^2=\beta_0^2+\vec{\beta}^2=1$

ne sugerează să considerăm

(3.70) $\beta_0=\cos\frac{\alpha}{2}$ şi $\vec{\beta}=\vec{n}\sin\frac{\alpha}{2}$.

Deci (U) se scrie ca o combinaţie liniară de matricile

(3.71) $(\sigma_1)=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $(\sigma_2)=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $(\sigma_3)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$,

numite matricile lui Pauli.

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pe de altă parte, matricea (U) asociată operatorului (3.59) poate fi scrisă sub forma

(3.72) $(U)=\exp\{i(A)\}=(I)_{2x2}+i(A)$,

de unde, pentru $(A)=\vec{\beta}\cdot(\vec{\sigma})$, se obţine (3.68). Parametrii $\{\beta^j\}$ fiind reali, rezultă că matricile lui Pauli satisfac relaţia

(3.73) $(\sigma_j)^+=(\sigma_j)$.

Dacă $(U)\in SU(2)$ este o matrice reală, atunci forma cea mai generală a ei va fi

$$(3.74)\quad (U)=\begin{pmatrix}\beta_0 & \beta_2\\ -\beta_2 & \beta_0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2} & \sin\frac{\alpha}{2}\\ -\sin\frac{\alpha}{2} & \cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix},$$

exprimând o rotaţie de coordonate în spaţiul bidimensional.

Se poate arăta că grupul rotaţiilor în 3 dimensiuni $O(3,\mathbb{R})$ este homeomorf cu $SU(2)$. Pentru aceasta, vom asocia fiecărei matrici $(U)_{2x2}\in SU(2)$ o matrice reală $(R)_{3x3}$, care transformă vectorul de poziţie

(3.75) $(\vec{r}')=(R)(\vec{r})$,

păstrându-i "lungimea". Astfel, matricea $3x3$

$$(3.76)\quad (R_3)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha & 0\\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

generează o rotaţie de unghi α în jurul axei Oz. Analog, se construieşte matricea de rotaţie în jurul lui Oy ca fiind

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$(3.77)\quad (R_2)=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & -\sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ \sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix}.$$

O rotaţie arbitrară poate fi exprimată în funcţie de unghiurile Euler α,β,γ prin

$$(3.78)\quad (U(\alpha,\beta,\gamma))=(U_3(\gamma))(U_2(\beta))(U_3(\alpha))$$

având matricea de rotaţie corespunzătoare [10], [41]

$$(3.79)\quad (R)=(R_3(\gamma))(R_2(\beta))(R_3(\alpha)).$$

Matricile de forma (3.68) formează o reprezentare bidimensională a grupului $SU(2)$. Prin aplicaţia (3.72) trecem de la reprezentarea grupului Lie 3-parametric la reprezentarea algebrei Lie $su(2)$ asociată acestuia, ai cărei generatori infinitezimali, definiţi prin relaţia (V.6.13), sunt reprezentaţi prin matricile lui Pauli. Tinând cont de forma concretă (3.71) a acestor matrici, putem calcula comutatorul, ca lege de compoziţie internă în $su(2)$ şi obţinem

$$(3.80)\quad \left[\frac{\sigma_i}{2},\frac{\sigma_j}{2}\right]=i\varepsilon_{ijk}\frac{\sigma_k}{2},\quad i,j,k=\overline{1,3}.$$

Indiferent de dimensiunea reprezentării algebrei $su(2)$, relaţiile de comutare a generatorilor trebuie să fie (3.80). Astfel, într-o reprezentare 3-dimensională a lui $su(2)$ matricile $(U)_{3x3}$ se vor scrie sub forma:

$$(3.81)\quad (U)_{3x3}=\exp\{i\beta^i J_{ij}\}\simeq (I)_{3x3}+i\beta^i(J_i),$$

unde matricile asociate generatorilor infinitezimali

$$(3.82)\quad (J_1)=-i\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{pmatrix},\ (J_2)=-i\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},\ (J_3)=-i\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

se obţin din matricile de rotaţie, prin derivarea acestora în raport cu

parametrii infititezimali, în vecinătatea elementului unitate al grupului,

(3.83) $(J_i) = -i \frac{\partial (R_i)}{\partial \beta^i} \Big|_{\beta=0}$

şi satisfac algebra (3.80), adică

(3.84) $[J_i, J_k] = i \varepsilon_{iks} J_s$.

In concluzie, $\{J_i\}_{i=\overline{1,3}}$ generează o reprezentare tridimensională a algebrei $su(2)$.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

VI.4. Ecuaţii de vectori şi valori proprii în exprimare Dirac

Prezentul paragraf, dedicat ecuaţiei de vectori şi valori proprii pentru operatorii liniari în spaţiul general al stărilor, reia o serie de definiţii şi proprietăţi prezentate pe larg în capitolul anterior, transcriindu-le în formalism $\langle bra|ket\rangle$. O atenţie deosebită se acordă noţiunii de observabile, acestea fiind asociate caracteristicilor măsurabile ale unui sistem fizic. Cunoaşterea setului complet de observabile, asociate sistemului, ce comută, exprimă posibilitatea măsurării lor simultane cu precizie nelimitată, în orice stare cuantică a sistemului.

A. VALORILE PROPRII SI VECTORII PROPRII AI UNUI OPERATOR PE $\mathscr{E}$

Pentru cazul general al operatorilor liniari ce acţionează pe spaţiul $\mathscr{E}$ al stărilor, definiţia V.4.15 se transcrie sub forma

Definiţia 4.1. Dacă $\hat{A}: \mathscr{E} \to \mathscr{E}$ este un operator liniar în spaţiul stărilor $\mathscr{E}$, atunci numărul complex $\alpha \in \mathbb{C}$ se numeşte valoare proprie a lui $\hat{A}$ dacă există cel puţin un vector ket $|\psi\rangle \neq 0$ din $\mathscr{E}$ soluţie a ecuaţiei de vectori şi valori proprii

$$\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle. \tag{4.1}$$

Mulţimea valorilor proprii $\{\alpha\}$ se numeşte spectrul operatorului $\hat{A}$. Fiecare vector $|\psi\rangle \in \mathscr{E}$ care este soluţie a ecuaţiei (4.1) se numeşte vector propriu al operatorului $\hat{A}$ asociat valorii proprii α. Dacă valoarea proprie α este degenerată, adică îi corespund mai mulţi vectori proprii liniar independenţi, atunci totalitatea lor subîntinde subspaţiul caracteristic corespunzător valorii

proprii α, notat $E_\alpha(\hat{A})$, de dimensiune egală cu gradul de degenerare al lui α.

Conjugând hermitic ecuaţia (4.1), adică

(4.2) $\langle\psi|\hat{A}^+ = \alpha^*\langle\psi|$,

rezultă că dacă $|\psi\rangle$ este un vector propriu al lui $\hat{A}$ corespunzător valorii proprii α, atunci $\langle\psi|$ este vector propriu al lui $\hat{A}^+$ corespunzător valorii proprii α^*.

Relaţiile (4.1) şi (4.2) ne permit să determinăm forma concretă a valorilor proprii ale operatorilor unitari. Intr-adevăr, pentru $\hat{A}^+\hat{A} = \hat{I}$, din (4.1) şi (4.2) rezultă

(4.3) $\langle\psi|\hat{A}^+\hat{A}|\psi\rangle = \alpha^*\alpha\langle\psi|\psi\rangle$,

de unde deducem că valoarea proprie α trebuie să satisfacă condiţia

(4.4) $|\alpha|^2 = 1$,

adică ea trebuie să fie de forma

(4.5) $\alpha = e^{i\varphi}$.

Cunoaşterea setului complet de vectori şi valori proprii ai unui operator liniar $\hat{A}: \mathcal{E} \to \mathcal{E}$ defineşte complet acţiunea acestuia în spaţiul Hilbert al stărilor. Astfel, fiind $|\xi\rangle$ un vector ket iar $\{|\psi_i\rangle\}$ şi $\{\alpha_i\}$ setul complet de vectori şi valori proprii ai operatorului complet continuu $\hat{A}$, avem

(4.6) $\hat{A}|\xi\rangle = \hat{A}\sum_i d_i|\psi_i\rangle = \hat{A}\sum_i \langle\psi_i|\xi\rangle|\psi_i\rangle = \sum_i \langle\psi_i|\alpha_i|\psi_i\rangle$.

Să alegem o reprezentare, adică o bază ortonormală $\{|i\rangle\}$ în spaţiul $\mathcal{E}$ presupus finit dimensional. Vectorul propriu $|\psi\rangle$ al operatorului $\hat{A}$ se scrie sub forma (2.1) şi deci relaţia (4.1) devine

(4.7) $\hat{A}\sum_i d_i|i\rangle = \sum_i \alpha d_i|i\rangle;\ d_i = \langle i|\psi\rangle$,

BCU "ASE" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care, ţinând cont de condiţia de ortonormalitate (2.3), ne conduce la

$$(4.8)\quad \sum_i d_i \langle j|\hat{A}|i\rangle = \alpha d_j$$

sau, utilizând (2.33), la

$$(4.9)\quad \sum_i (A_{ji} - \alpha\delta_{ji}) d_i = 0,\ j=\overline{1,N}.$$

Am obţinut astfel un sistem liniar şi omogen de N ecuaţii pentru necunoscutele $\{d_i\}_{i=\overline{1,N}}$ reprezentând proiecţiile vectorului propriu $|\psi\rangle$ pe vectorii bazei ortonormale. Pentru ca (4.9) să aibă soluţii nebanale trebuie impusă condiţia

$$(4.10)\quad \det(A_{ji} - \alpha\delta_{ji}) = 0,$$

adică

$$(4.11)\quad \begin{vmatrix} A_{11}-\alpha & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22}-\alpha & \dots & A_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN}-\alpha \end{vmatrix} = 0.$$

Această ecuaţie de gradul N pentru α, numită ecuaţia caracteristică (ecuaţie seculară) ne furnizează valorile proprii ale operatorului $\hat{A}$. Evident, ea este independentă de baza ortonormală în care lucrăm, dat fiind că orice transformare de tipul (3.16), cu $U \in SU(N)$, lasă invariantă această ecuaţie. Astfel, se poate efectua o transformare prin care să aducem matricea (A) asociată operatorului $\hat{A}$ la forma diagonală (A'). In acest caz elementele diagonale $\{A'_{ii}\}$ sunt chiar valorile proprii $\{\alpha_i\}$ ale operatorului considerat. Rezultă de aici că, în cadrul formalismului matricial, problema găsirii valorilor proprii ale unui operator liniar este echivalentă cu problema diagonalizării matricei asociate acestuia. Dacă rădăcina α a ecuaţiei caracteristice este multiplă de ordinul $g>1$, atunci, pentru operatorii

autoadjuncţi, această multiplicitate este egală cu gradul de degenerare al valorii proprii α, adică cu dimensiunea subspaţiului caracteristic $\{E_\alpha(\hat{A})\}$.

In continuare, ne vom referi la modalitatea de găsire a vectorilor proprii corespunzători valorii proprii α_0. Vom considera, pentru început, cazul în care α_0 este o rădăcină simplă a ecuaţiei (4.11). In acest caz, sistemul (4.9), adică

$$(4.12)\quad \sum_i (A_{ji}-\alpha_0\delta_{ji})d_i=0,\ j=\overline{1,N},$$

conţine $(N-1)$ ecuaţii independente pentru cele N necunoscute. Pentru determinarea soluţiilor, să fixăm una dintre necunoscute, de exemplu d_k, şi să trecem în membrul drept termenii în aceasta. Sistemul (4.12) devine

$$\begin{aligned}(4.13)\quad &(A_{j1}-\alpha_0\delta_{j1})d_1+\ldots+(A_{j,k-1}-\alpha_0\delta_{j,k-1})d_{k-1}+\\ &+(A_{j,k+1}-\alpha_0\delta_{j,k+1})+\ldots+(A_{jN}-\alpha_0\delta_{jN})d_N=\\ &=-(A_{jk}-\alpha_0\delta_{jk})d_k\ ;\ j=\overline{1,N-1},\end{aligned}$$

adică un sistem neomogen de $(N-1)$ ecuaţii liniare ale cărui soluţii vor putea fi căutate sub forma

$$(4.14)\quad d_j=m_j(\alpha_0)d_k.$$

Astfel, sistemul (4.13) devine un sistem Cramer cu soluţii unice pentru $m_j(\alpha_0)$, $j\neq k$.

Vectorul propriu $|\psi_0\rangle$ va fi determinat deci până la o constantă arbitrară

$$(4.15)\quad |\psi_0\rangle=\sum_j d_j|j\rangle=d_k\sum_j m_j(\alpha_0)|j\rangle,$$

ce poate fi determinată din condiţia de normare $\langle\psi_0|\psi_0\rangle=1$.

Evident, orice vector proporţional cu $\sum_j m_j(\alpha_0)|j\rangle$ satisface ecuaţia de

vectori şi valori proprii (4.1), ei nefiind liniar independenţi ci coliniari cu acesta. Deci, subspaţiul $\{E_{\alpha_0}(\hat{A})\}$ are dimensiunea 1, egală cu multiplicitatea rădăcinii α_0.

Dacă α_0 este o rădăcină a ecuaţiei caracteristice cu multiplicitatea s, atunci sistemul (4.9) va conţine $(N-s)$ ecuaţii independente. Vom fixa primele s necunoscute ca fiind $\{d_1,...,d_s\}$ şi vom rezolva, ca şi în cazul precedent, sistemul neomogen de $(N-s)$ ecuaţii liniare ale cărui soluţii vor fi de forma

(4.16) $d_j = m_j^1 d_1 + m_j^2 d_2 + \ldots + m_j^s d_s$, $j=s+1,...,N$.

Vectorii proprii asociaţi valorii proprii α_0, adică

(4.17) $|\psi_0\rangle = \sum_j d_j|j\rangle = d_1\sum_j m_j^1|j\rangle + \ldots + d_s\sum_j m_j^s|j\rangle$, $j=\overline{s+1,N}$

vor fi elemente ale unui spaţiu vectorial s dimensional, căci vectorii $\sum_j m_j^1|j\rangle$,... sunt univoc determinaţi.

In practică există cazuri simple în care ecuaţia de vectori şi valori proprii (4.1) este suficientă pentru determinarea spectrului unor operatori. Să considerăm de exemplu operatorul $\hat{A}$ cu proprietatea

(4.18) $\hat{A}^2 = \hat{I}$, $\hat{I}$ = *operatorul unitate*,

numit operator de involuţie. Aplicăm operatorul $\hat{A}$ ecuaţiei (4.1) şi avem

(4.19) $\hat{A}^2|\psi\rangle = \alpha^2|\psi\rangle$,

de unde, utilizând (4.18), deducem valorile proprii ale operatorului $\hat{A}$ ca fiind

(4.20) $\alpha_1 = +1$; $\alpha_2 = -1$.

Identitatea

(4.21) $\hat{A}(\hat{I}+\hat{A})|\xi\rangle = (\hat{I}+\hat{A})|\xi\rangle$

ne conduce la concluzia că vectorul ket $|\psi_1\rangle=(\hat{I}+\hat{A})|\xi>$, unde $|\xi>$ este un element oarecare al lui $\mathscr{E}$, este chiar vectorul propriu corespunzător valorii proprii α_1, iar identitatea

(4.22) $\hat{A}(\hat{I}-\hat{A})|\xi>=-(\hat{I}-\hat{A})|\xi>$

ne arată că $|\psi_2\rangle=(\hat{I}-\hat{A})|\xi>$ este vectorul propriu corespunzător lui α_2. Evident, orice vector $|\xi>\in\mathscr{E}$ poate fi scris ca o combinaţie liniară

(4.23) $|\xi>=\frac{1}{2}\left(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle\right)$.

Al doilea exemplu simplu este cel al operatorului de proiecţie (1.35) pentru care ecuaţia de vectori şi valori proprii este

(4.24) $\hat{\Pi}_\psi|\varphi>=\alpha|\varphi>$,

adică

(4.25) $<\psi|\varphi>|\psi>=\alpha|\varphi>$.

Membrul drept poate fi un vector coliniar cu $|\psi>$, caz în care $|\varphi>=|\psi>$ şi $\alpha_1=1$, sau poate fi egal cu zero, pentru cazul în care $|\varphi>$ este ortogonal pe $|\psi>$ şi deci $\alpha_2=0$. Pentru aflarea vectorilor proprii corespunzător valorii proprii simple α_1 şi valorii proprii infinit degenerate α_2 vom utiliza egalităţile evidente:

(4.26) $\hat{\Pi}_\psi\left(\hat{\Pi}_\psi|\varphi>\right)=\hat{\Pi}_\psi|\varphi>$

şi

(4.27) $\hat{\Pi}_\psi\left(\hat{1}-\hat{\Pi}_\psi\right)|\varphi>=0$.

Deci, vectorul propriu corespunzător valorii proprii $\alpha_1=1$ este $\hat{\Pi}_\psi|\varphi>$ iar $\left(\hat{1}-\hat{\Pi}_\psi\right)|\varphi>$ corespunde lui $\alpha_2=0$. Ca şi în cazul anterior, se observă imediat că orice element al spaţiului stărilor se scrie ca o combinaţie liniară a vectorilor proprii, adică

(4.28) $|\varphi>=\hat{\Pi}_{\psi}|\varphi>+\left(\hat{1}-\hat{\Pi}_{\psi}\right)|\varphi>$.

In încheierea acestui subparagraf facem observaţia că problema găsirii vectorilor şi valorilor proprii ale unui operator a fost abordată în paragraful anterior în cazul concret al unui sistem descris de hamiltonianul exprimat prin matricea autoadjunctă (3.35). Prin aducerea acestei matrici la forma diagonală, s-au obţinut de fapt valorile proprii ale operatorului $\hat{H}$

(4.29) $\alpha_{1,2}=H_0\mp\chi$.

Astfel, pentru rădăcina $\alpha_1=H_0-\chi$, sistemul (4.12) se reduce la relaţia

(4.30) $d_1+d_2=0$,

adică

(4.31) $d_1=-d_2$,

conducând la vectorul propriu

(4.32) $|\psi_1\rangle=d_1(|1>-|2>)$,

sau, ţinând cont de expresia concretă a vectorilor bazei, la matricea asociată acestuia

(4.33) $(\psi)_i=d_1\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$,

care, prin impunereaa condiţiei de normare, coincide cu (3.48). Pentru rădăcina $\alpha_2=H_0+\chi$, vectorul propriu corespunzător va fi (3.49).

B. DEFINIREA RIGUROASA A OBSERVABILELOR ASOCIATE MARIMILOR FIZICE COMPATIBILE CU PROCESUL DE MASURARE IN MECANICA CUANTICA

Deoarece problema vectorilor şi valorilor proprii ale unui operator autoadjunct $\hat{A}$ în spaţiul Hilbert E a constituit subiectul paragrafului V.5.c, în cele ce urmează vom transcrie principalele proprietăţi ale operatorilor

autoadjuncţi în spaţiul general $\mathscr{E}$ al vectorilor de stare, insistând în special asupra noţiunii de observabilă.

Conform teoremelor V.5.28-29, orice operator (nenul) autoadjunct şi compact $\hat{A}: \mathscr{E} \to \mathscr{E}$ admite cel puţin o valoare proprie (nenulă) α_0 şi un vector propriu $|\psi_0\rangle$, orice subspaţiu α – caracteristic fiind de dimensiune finită. Din teoremele V.5.25-27, putem enunţa următoarele proprietăţi ale operatorilor autoadjuncţi, referitoare la vectorii şi valorile proprii ale acestora.

a) *Toate valorile proprii ale unui operator autoadjunct sunt reale.*

Demonstraţie. Inmulţim ecuaţiile de vectori şi valori proprii (4.1) şi (4.2) cu $\langle\psi|$ şi respectiv $|\psi\rangle$ şi, utilizând proprietatea $\hat{A}^+ = \hat{A}$, obţinem imediat că $\alpha^* = \alpha$.

b) *Doi vectori proprii corespunzând la valori proprii diferite sunt ortogonali.*

Demonstraţie. Fie vectrii proprii $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$ ai operatorului autoadjunct $\hat{A}$, corespunzând valorilor proprii α_1 şi respectiv α_2, adică

$$\hat{A}|\psi_1\rangle = \alpha_1|\psi_1\rangle$$

$$\hat{A}|\psi_2\rangle = \alpha_2|\psi_2\rangle .$$

Multiplicând prima ecuaţia cu $\langle\psi_2|$ şi a doua cu $\langle\psi_1|$ şi scăzând adjuncta celei de a doua relaţii din prima, avem

$$0 = (\alpha_1 - \alpha_2)\langle\psi_2|\psi_1\rangle ,$$

care, în ipoteza $\alpha_1 \neq \alpha_2$, ne conduce la

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 . \qquad \text{(q.e.d.)}$$

c) *Vectorii proprii diferiţi aparţinând aceleiaşi valori proprii pot fi aleşi astfel încât să fie ortogonali.*

Demonstraţia se bazează atât pe faptul că orice combinaţie liniară de forma $a_1\psi_1+a_2\psi_2$, unde ψ_1 şi ψ_2 sunt vectori proprii corespunzători valorii proprii α, este de asemenea vector propriu corespunzător valorii proprii α, al operatorului considerat cât şi pe procedeul descris în demonstrarea teoremei V.2.22. Fie operatorul autoadjunct $\hat{A}$ cu valoarea proprie α_n având degenerarea $g(n)$ şi vectorii proprii corespunzători $\left\{\left|\psi_n^\mu\right\rangle\right\}_{\overline{\mu=1,g(n)}}$ soluţii ale ecuaţiei

$$\hat{A}\left|\psi_n^\mu\right\rangle=\alpha_n\left|\psi_n^\mu\right\rangle;\ \mu=\overline{1,g(n)}. \tag{4.34}$$

Setul ortogonal $\left\{\left|\varphi_n^\mu\right\rangle\right\}$ poate fi construit pornind de la

$$\left|\varphi_n^1\right\rangle=\left|\psi_n^1\right\rangle. \tag{4.35}$$

Următorul vector este de forma

$$\left|\varphi_n^2\right\rangle=\left|\psi_n^2\right\rangle+a_1\left|\varphi_n^1\right\rangle=\left|\psi_n^2\right\rangle+a_1\left|\psi_n^1\right\rangle, \tag{4.36}$$

unde a_1 se determină din condiţia de ortogonalitate

$$\left\langle\varphi_n^1\middle|\varphi_n^2\right\rangle=\left\langle\psi_n^1\middle|\psi_n^2\right\rangle+a_1\left\langle\psi_n^1\middle|\psi_n^1\right\rangle=0, \tag{4.37}$$

ca fiind

$$a_1=-\frac{\left\langle\psi_n^1\middle|\psi_2^2\right\rangle}{\left\langle\psi_n^1\middle|\psi_n^1\right\rangle}. \tag{4.38}$$

Mai departe, din condiţia ca vectorul

$$\left|\varphi_n^3\right\rangle=\left|\psi_n^3\right\rangle+a_3\left|\varphi_n^2\right\rangle+a_2\left|\varphi_n^1\right\rangle \tag{4.39}$$

să fie ortogonal pe $\left|\varphi_n^1\right\rangle$ şi $\left|\varphi_n^2\right\rangle$ se determină constantele a_2 şi a_3:

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$a_2 = -\frac{\langle \varphi_n^1 | \psi_n^3 \rangle}{\langle \varphi_n^1 | \varphi_n^1 \rangle}$$

(4.40)

$$a_3 = -\frac{\langle \varphi_n^2 | \psi_n^3 \rangle}{\langle \varphi_n^2 | \varphi_n^2 \rangle}.$$

Prodecedul descris se aplică până la obţinerea formei concrete a şirului de vectori ortogonali $\left\{ |\varphi_n^\mu\rangle \right\}_{\mu=\overline{1,g(n)}}$. (q.e.d.).

Reciproc, se poate arăta că orice operator liniar având un set ortonormal, complet de vectori proprii $\{|i\rangle\}$ şi un set de valori proprii reale $\{\alpha_i\}$, este autoadjunct. Pentru aceasta, să calculăm produsul scalar

$$(\hat{A}|\xi\rangle, |\eta\rangle) = \langle \xi | \hat{A}^+ | \eta \rangle = \sum_{i,j} a_i^* b_j (\langle i | \hat{A}^+) | j \rangle =$$

(4.41)

$$= \sum_{i,j} a_i^* b_j \alpha_i^* \langle i | j \rangle = \sum_{i,j} a_i^* b_j \alpha_i \delta_{ij} = \sum_i a_i^* b_i \alpha_i$$

şi produsul scalar

$$(|\xi\rangle, \hat{A}|\eta\rangle) = \langle \xi | \hat{A} | \eta \rangle = \sum_{i,j} a_i^* b_j \langle i | (\hat{A} | j \rangle) =$$

(4.42)

$$= \sum_{i,j} a_i^* b_j \alpha_j \langle i | j \rangle = \sum_{i,j} a_i^* b_j \alpha_j \delta_{ij} = \sum_i a_i^* b_i \alpha_i.$$

Egalitatea membrului drept al celor două expresii ne conduce la concluzia că, deoarece $\langle \xi | \hat{A}^+ | \eta \rangle = \langle \xi | \hat{A} | \eta \rangle$, operatorul $\hat{A}$ este autoadjunct.

Proprietăţile a) şi b) ne permit să construim sistemul ortonormal de vectori proprii ai operatorului autoadjunct $\hat{A}$, notat $\{n\mu\rangle\}$ cu $n = \overline{1, dim\, \mathcal{E}}$ şi $\mu = \overline{1, g(n) = dim\, \mathcal{E}_n}$. Evident,

(4.43) $\langle n\mu | n'\mu' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\mu\mu'}$.

BCU Cluj / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 4.2. Operatorul autoadjunct al cărui sistem ortonormal de vectori proprii formează o bază în spaţiul stărilor poartă numele de observabilă.

In virtutea teoremei V.5.32, este valabilă relaţia

$$(4.44)\quad \hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \sum_{\mu=1}^{g(n)} |n\mu\rangle\langle n\mu|\hat{A}|\psi\rangle,\ (\forall)\,|\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

de unde, utilizând ecuaţia de vectori şi valori proprii

$$(4.45)\quad \hat{A}|n\mu\rangle = \alpha_n |n\mu\rangle$$

şi autoadjunctivitatea operatorului $\hat{A}$, se obţine

$$(4.46)\quad \hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \sum_{\mu=1}^{g(n)} \alpha_n |n\mu\rangle\langle n\mu|\psi\rangle,$$

care, având în vedere definiţia V.5.125 a operatorului de proiecţie transcrisă în formalism *<bra|ket>* ca fiind

$$(4.47)\quad \hat{\Pi}_\psi = \sum_{\mu=1}^{g(n)} |n\mu\rangle\langle n\mu|,$$

poate fi adusă la forma

$$(4.48)\quad \hat{A}|\psi\rangle = \sum_n \alpha_n \hat{\Pi}_n |\psi\rangle,\ (\forall)\,|\psi\rangle \in \mathcal{E}.$$

Găsim astfel pentru $\hat{A}$ reprezentarea spectrală (V.5.12), explicitată în formalism *<bra|ket>*, prin expresia

$$(4.49)\quad \hat{A} = \sum_n \sum_{\mu=1}^{g(n)} \alpha_n |n\mu\rangle\langle n\mu|,$$

unde α_n sunt valorile proprii ale operatorului autoadjunct $\hat{A}$ iar $\hat{\Pi}_n$ este proiectorul pe subspaţiul α_n-caracteristic.

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Definiţia 4.3. Valoarea medie $<A>$ a observabilei $\hat{A}$ în starea $|\psi>$ este

(4.50) $<A>=<\psi|\hat{A}|\psi>$.

Pentru justificarea acestei relaţii, vom scrie mai întâi vectorul $|\psi>$ sub forma

(4.51) $|\psi>=\sum_{n}\sum_{\mu=1}^{g(n)}|n\mu><n\mu|\psi>$ cu $d_{n\mu}=<n\mu|\psi>$,

vom calcula, utilizând (4.45), expresia $<\psi|\hat{A}|\psi>$ şi vom obţine

(4.52) $$<\psi|\hat{A}|\psi>=\sum_{n}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\sum_{n'}\sum_{\mu'=1}^{g(n)}<\psi|n\mu><n\mu|\hat{A}|n'\mu'><n'\mu'|\psi>=$$
$$=\sum_{n}\sum_{\mu=1}^{g(n)}\sum_{n'}\sum_{\mu'=1}^{g(n)}d^{*}_{n\mu}d_{n'\mu'}\alpha_{n'}\delta_{nn'}\delta_{\mu\mu'}=\sum_{n}\sum_{\mu=1}^{g(n)}|d_{n\mu}|^{2}\alpha_{n},$$

relaţie ce coincide, aşa cum era de aşteptat, cu (V.7.23).

In aplicaţie şi în înseşi bazele Mecanicii Cuantice, definirea completă a stărilor unui microsistem dat fiind realizată prin cunoaşterea numărului maxim de observabile care comută asociate sistemului, în cele ce urmează vom prezenta câteva teoreme referitoare la vectorii şi valorile proprii a două observabile ce comută.

Teorema 4.1. Dacă operatorii $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ comută şi $|\psi>$ este un vector propriu al lui $\hat{A}$ aparţinând valorii proprii α, atunci $\hat{B}|\psi>$ este un element al spaţiului $\mathscr{E}_{\alpha}$. Dacă valoarea proprie α este nedegenerată, atunci $|\psi>$ este vector propriu şi al lui $\hat{B}$.

Demonstraţie. Conform ipotezei, putem scrie

(4.53) $\hat{A}(\hat{B}|\psi>)=\hat{B}\hat{A}|\psi>=\alpha(\hat{B}|\psi>)$,

care ne indică faptul că $\hat{B}|\psi>$ este vector propriu al lui $\hat{A}$ corespunzător valorii proprii α, deci un element al spaţiului $\mathscr{E}_{\alpha}$. Dacă α este nedegenerată,

BUCHAREST UNIVERSITY LIBRARY

atunci $\hat{B}|\psi>$ este un vector coliniar cu $|\psi>$, adică

(4.54) $\hat{B}|\psi>=\beta|\psi>$,

deci un vector propriu al lui $\hat{B}$ corespunzător valorii proprii β. (q.e.d.).

Teorema 4.2. Dacă observabilele $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ comută şi $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$ sunt vectori proprii ai lui $\hat{A}$ corespunzători valorilor proprii $\alpha_1 \neq \alpha_2$, atunci

(4.55) $\langle\psi_1|\hat{B}|\psi_2\rangle=0$.

Demonstraţia este imediată având în vedere că dacă $|\psi_2\rangle$ este un vector propriu al lui $\hat{A}$ atunci, conform teoremei 4.1 şi $\hat{B}|\psi_2>$ este vector propriu al lui $\hat{A}$ aparţinând aceleiaşi valori proprii α_2 iar vectorii proprii aparţinând la valori proprii diferite sunt ortogonali.

(q.e.d.)

Propoziţie. Se poate de asemenea arăta că relaţia (4.55) rămâne valabilă şi pentru cazul în care observabilele $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ anticomută, dacă $\alpha_1+\alpha_2\neq 0$.

Demonstraţie. Dacă $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$ sunt vectori proprii ai lui $\hat{A}$ corespunzători valorilor proprii α_1 şi respectiv α_2, atunci avem

(4.56) $\langle\psi_1|\{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}\}|\psi_2\rangle=(\alpha_1+\alpha_2)\langle\psi_1|\hat{B}|\psi_2\rangle$.

Pe de altă parte, deoarece

(4.57) $\hat{A}\left(\hat{B}|\psi_2\rangle\right)=-\hat{B}\hat{A}|\psi_2\rangle=-\alpha_2\hat{B}|\psi_2\rangle$,

rezultă că $\hat{B}|\psi_2\rangle$ este vector propriu al lui $\hat{A}$ corespunzător valorii proprii $-\alpha_2$, care, prin ipoteză, este diferită de α_1. In concluzie, $|\psi_1\rangle$ şi $\hat{B}|\psi_2\rangle$ fiind vectori proprii ai lui $\hat{A}$ corespunzând la valori proprii diferite, sunt ortogonali, adică

$$\langle\psi_1|\hat{B}|\psi_2\rangle=0.\ \text{(q.e.d.)}.$$

Observaţie importantă. Din teorema 4.1 rezultă că pentru valori proprii nedegenerate, două observabile care comută au un set comun de vectori şi valori proprii. Dacă valorile proprii $\{\alpha_n\}$ ale observabilei $\hat{A}$ sunt degenerate, atunci, deşi $|\psi>$ este un vector propriu al lui $\hat{A}$ corespunzător lui α_n el nu este neaparat şi vector propriu al lui $\hat{B}$. In schimb, conform teoremei V.6.8 este întotdeauna posibil să construim o bază ortonormală în spaţiul stărilor, formată din vectorii proprii comuni operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$.

In continuare, vom prezenta modalitatea concretă prin care se asociază unui microsistem fizic un set complet de observabile, cu scopul descrierii complete a stărilor cuantice ale acestuia [9], [46], [49].

Definiţia 4.3. Un set de observabile care comută este complet dacă pentru un set dat de valori proprii ale acestor operatori, vectorul propriu comun este unic determinat.

Dacă observabila $\hat{A}$ are spectrul nedegenerat, adică fiecărei valori proprii α_n îi corespunde un singur vector propriu $|n>$, atunci, în baza definiţiei 4.2., sistemul ortonormal de vectori proprii $\{|n>\}$ formează o bază în spaţiul stărilor şi, aceasta fiind unică, putem afirma că observabila $\hat{A}$ formează un set complet de observabile. pentru microsistemul considerat. Rezultatul măsurării lui $\hat{A}$ în starea cuantică $|n>$ va fi, cu certitudine, valoarea determinată $\alpha_n=\langle n|\hat{A}|n\rangle$. Orice vector de stare $|\psi>\in\mathcal{E}$ poate fi exprimat ca o combinaţie liniară $|\psi>=\sum_n d_n|n>$, unde $|d_n|^2$ reprezintă probabilitatea ca valoarea măsurată a observabilei să fie α_n, şi astfel

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle=\sum_n |d_n|^2\alpha_n. \tag{4.58}$$

Presupunem acum că valoarea proprie α_n este degenerată. In acest caz, baza ortonormală de vectori proprii ai observabilei $\hat{A}$ nu mai este unică. Pentru fixarea vectorului propriu, adăugăm numărului cuantic n, un al doilea număr cuantic, să zicem m, vectorul $|nm>$ fiind acum un vector propriu comun operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ care comută. Dacă perechii $\{\alpha_n, \beta_m\}$, unde α_n şi β_m sunt valori proprii ale celor doi operatori, îi corespunde un singur vector propriu comun $|nm>$, atunci observabilele $\{\hat{A},\hat{B}\}$ formează un set complet, adică la o măsurare simultană a observabilelor care comută $\hat{A}$ şi $\hat{B}$, vom obţine, în starea cuantică $|nm>$, cu certitudine, valoarea α_n pentru $\hat{A}$ şi β_m pentru $\hat{B}$. Se mai spune că observabilele $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ sunt compatibile. Dacă baza formată din funcţiile proprii comune operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ nu este unică, adică perechii (α_n, β_m) îi corespund în continuare mai mulţi vectori proprii $|nm>$, atunci se adaugă o a treia observabilă $\hat{C}$, care comută cu $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ şi aşa mai departe, până la ridicarea completă a degenerării. Pentru un set complet de observabile, valorile proprii $\{\alpha_n, \beta_m, \gamma_p, etc.\}$ determină, în mod unic, vectorul de stare $|nmp...>$, o măsurare simultană a acestor observabile conducând, în mod cert, la rezultatele previzibile $\alpha_n, \beta_m, \gamma_p, etc.$. Invers, orice măsurătoare care are drept rezultate $\alpha_n, \beta_m, \gamma_p, etc.$ lasă sistemul în starea cuantică reprezentată prin vectorul propriu $|nmp\ etc.>$.

In concluzie, putem spune că în Mecanica Cuantică, starea unui sistem fizic este reprezentată printr-un vector de stare $|\psi> \in \mathscr{E}$, iar fiecare caracteristică măsurabilă a sistemului printr-o observabilă. Dacă, prin procesul de măsurare, se asociază observabilei ce corespunde unei mărimi fizice într-o stare cuantică, o valoare determinată, adică dacă pentru fiecare rezultat al măsurării există o stare cuantică în care mărimea fizică are cu certitudine

valoarea respectivă, atunci măsurarea este exact previzibilă. Pentru descrierea completă a unei stări cuantice este necesar să introducem noţiunea de set complet de observabile ca fiind anasamblul observabilelor ce au simultan valori determinate, orice altă observabilă (ce nu este funcţie de acestea) neputând avea, în starea respectivă, valoare determinată. Evident, posibilitatea măsurării simultane a acestor observabile, cu o precizie oricât de bună, impune anularea comutatorului oricăror două dintre ele, caz în care relaţia (V.8.28) devine $\Delta\hat{A}\cdot\Delta\hat{B}\geq 0$.

VI.5. Reprezentările fundamentale $\{|\vec{r}>\}$ şi $\{|\vec{p}>\}$.

Prezentul paragraf evidenţiază legătura dintre teoria dezvoltată în spaţiul abstract al stărilor, utilizat în formalismul *<bra|ket>* şi mecanica ondulatorie, în formulare Schrödinger, privită ca o realizare a spaţiului $\mathscr{E}$, prin alegerea bazei particulare a stărilor proprii ale operatorilor de poziţie ai sistemului.

Considerăm cazul unei particule descrisă de o funcţie de undă $\psi\in\mathfrak{L}^2$ care, într-o bază discretă ortonormală $\{\chi_i\}$ se scrie ca o dezvoltare $\psi=\sum_i d_i\chi_i$, coeficienţii $d_i=(\chi_i,\psi)$ fiind chiar "proiecţiile" lui ψ pe şirul discret al vectorilor bazei. Evident, schimbarea reprezentării implică obţinerea unui alt set de "componente", corespunzătoare noii baze.

După cum am mai discutat, la începutul acestui capitol, funcţiei de undă $\psi\in\mathfrak{L}^2$ îi corespunde un vector ket $|\psi>\in\mathscr{E}$, iar fiecărei perechi $|\psi>, |\phi>$ i se asociază numărul complex $<\psi|\phi>=(\psi,\phi)$. Inlocuind baza ortonormală discretă $\{|i>\}$ cu şirul continuu de vectori ket generalizaţi $\{|\alpha>\}$, am pus în evidenţă relaţia de ortogonalitate (2.16) şi relaţia de închidere (2.17).

Cele discutate mai sus pot fi înţelese prin analogie cu studiul mişcării unei particule a cărei poziţie în spaţiul tridimensional este dată de vectorul de

poziţie $\vec{r}$, adică de componentele sale $\{x,y,z\}$, pe vectorii bazei carteziene $\{\vec{i},\vec{j},\vec{k}\}$. In Mecanica Cuantică, coordonatele $\{x,y,z\}$ sunt privite ca valori proprii ale observabilelor $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$, scrise comprimat $\hat{\vec{r}}$, adică

(5.1) $\hat{\vec{r}}|\vec{r}>=\vec{r}|\vec{r}>$,

într-o bază continuă $\{|\vec{r}>\}$ satisfăcând relaţiile de ortogonalitate şi închidere

(5.2) $<\vec{r}|\vec{r}'>=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

şi respectiv

(5.3) $\int d\vec{r}\,|\vec{r}><\vec{r}'|=\hat{I}$.

Importanţa pe care o are în fizică transformata Fourier a funcţiilor de stare, ne determină să dezvoltăm, în mod cu totul analog reprezentării $\{|\vec{r}>\}$, şi reprezentarea $\{|\vec{p}>\}$ insistând asupra formulelor de trecere de la una la cealaltă.

A. REPREZENTAREA $\{|\vec{r}>\}$

Considerăm, pentru început, cazul monodimensional şi scriem vectorul de stare $|\psi>$ în dezvoltare după baza continuă $\{|x>\}$ ca fiind

(5.4) $|\psi>=\int f(x)\,|x>dx$.

Efectuarea produsului scalar

$$<x'|\psi>=\int f(x)<x'|x>dx=\int f(x)\,\delta(x'-x)\,dx=f(x')$$

conduce la relaţia

(5.5) $<x'|\psi>=f(x')\equiv\psi(x')$,

de unde rezultă

(5.6) $|\psi>=\int\psi(x)\,|x>dx$,

ceea ce evidenţiază că

(5.7) $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$

este tocmai funcţia de undă în formularea Schrödinger. Impunând ca $|\psi\rangle$ să fie vector propriu al lui $\hat{x}$, adică

(5.8) $\hat{x}|\psi\rangle=x|\psi\rangle$,

deci

(5.9) $|\psi\rangle=|x\rangle$,

obţinem imediat

(5.10) $\langle x'|\psi\rangle=\psi(x')=\langle x'|x\rangle=\delta(x'-x)$,

ceea ce arată că lui $\psi(x')=\delta(x'-x)$ îi corespunde vectorul ket $|x'\rangle$.

Generalizăm aceste consideraţii la spaţiul tridimensional. Obţinem astfel componentele funcţiei de undă Schrödinger $\psi(\vec{r})$ ca fiind

(5.11) $\psi(\vec{r})=\langle\vec{r}|\psi\rangle$,

vectorul ket corespunzător putând fi scris, în dezvoltare după baza $\{|\vec{r}\rangle\}$, sub forma

(5.12) $|\psi\rangle=\int d\vec{r}\,|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle$.

Conjugata complexă $\psi^*(\vec{r})$ are componentele

(5.13) $\psi^*(\vec{r})=\langle\psi|\vec{r}\rangle$,

iar dezvoltarea vectorului bra corespunzător este dată de conjugata hermitică a relaţiei (5.12).

Calculând produsul scalar

(5.14) $\langle\psi|\varphi\rangle=\int d\vec{r}\langle\psi|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\varphi\rangle=\int d\vec{r}\,\psi^*(\vec{r})\varphi(\vec{r})$,

în care am utilizat (5.3), regăsim, aşa cum era de aşteptat, expresia produsului scalar a două funcţii aparţinând spaţiului $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$.

Relaţia (5.8) ne permite să introducem operatorul $\hat{x}$ prin

(5.15) $\langle\vec{r}|\hat{x}|\psi\rangle=x\langle\vec{r}|\psi\rangle$

şi, în mod analog, operatorii $\hat{y}$ şi $\hat{z}$ prin

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.16) $\langle\vec{r}|\hat{y}|\psi\rangle = y\langle\vec{r}|\psi\rangle$

(5.17) $\langle\vec{r}|\hat{z}|\psi\rangle = z\langle\vec{r}|\psi\rangle$.

In reprezentarea $\{|\vec{r}\rangle\}$, elementele matricilor corespunzătoare acestor operatori sunt date de relaţiile

(5.18) $\langle\vec{r}|\hat{x}|\vec{r}'\rangle = x\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle = x\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

(5.19) $\langle\vec{r}|\hat{y}|\vec{r}'\rangle = y\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle = y\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$

(5.20) $\langle\vec{r}|\hat{z}|\vec{r}'\rangle = z\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle = z\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$,

care pot fi scrise comprimat în forma

(5.21) $\langle\vec{r}|\hat{\vec{r}}|\vec{r}'\rangle = \vec{r}\,\delta(\vec{r}-\vec{r}')$.

Pe de altă parte, relaţia (5.18) conduce la ecuaţia de vectori şi valori proprii pentru operatorul $\hat{x}$:

$$\hat{x}|\vec{r}'\rangle = x|\vec{r}'\rangle,$$

sau

(5.22) $\hat{x}|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle$.

In mod analog, obţinem relaţiile:

(5.23) $\hat{y}|\vec{r}\rangle = y|\vec{r}\rangle$

şi

(5.24) $\hat{z}|\vec{r}\rangle = z|\vec{r}\rangle$,

ce pune în evidenţă faptul că $|\vec{r}\rangle$ sunt vectori proprii comuni operatorilor $\hat{x},\hat{y}$ şi $\hat{z}$ cu valorile proprii corespunzătoare x,y,z.

Operatorul $\hat{\vec{r}}$ este o observabilă, autoadjunctivitatea acestuia fiind verificată imediat, prin utilizarea relaţiei

$$\langle\varphi|\hat{\vec{r}}|\psi\rangle = \int d\vec{r}\,d\vec{r}'\langle\varphi|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle =$$

(5.25) $$= \int d\vec{r}'\,d\vec{r}\,\varphi^*(\vec{r}')\vec{r}\,\delta(\vec{r}'-\vec{r})\psi(\vec{r}) =$$

$$= \left[\int d\vec{r}'\,d\vec{r}\,\psi^*(\vec{r})\vec{r}\,\delta(\vec{r}'-\vec{r})\,\varphi(\vec{r}')\right]^* = \langle\psi|\hat{\vec{r}}|\varphi\rangle^*.$$

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dat fiind că operatorii $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ comută, valorile proprii ale acestora pot fi determinate simultan în oricare din stările proprii $|\vec{r}>$ ale sistemului, adică acestea formează un set complet de observabile, în reprezentarea de coordonate.

B. REPREZENTAREA $\{|\vec{p}>\}$

Vom transcrie relaţiile prezentate mai sus în cazul în care reprezentarea de coordonată $\{|\vec{r}>\}$ este înlocuită cu reprezentarea de impuls $\{|\vec{p}>\}$, relaţiile de trecere de la o reprezentare la alta urmând să fie explicitate în subparagraful următor.

Ca şi în cazul anterior, baza continuă $\{|\vec{p}>\}$ satisface relaţiile de ortogonalitate

(5.26) $<\vec{p}|\vec{p}'>=\delta(\vec{p}-\vec{p}')$

şi relaţia de închidere

(5.27) $\int d\vec{p}\,|\vec{p}><\vec{p}'|=\hat{I}$,

care ne vor permite să scriem vectorul ket $|\psi>$ în dezvoltarea după baza $\{|\vec{p}>\}$ sub forma

(5.28) $|\psi>=\int d\vec{p}\,|\vec{p}><\vec{p}|\psi>$,

unde

(5.29) $\psi(\vec{p})=<\vec{p}|\psi>$

reprezintă componentele funcţiei de undă Schrödinger în noua bază. Acestea pot fi raportate la $\psi(\vec{r})$ prin transformarea Fourier

(5.30) $\psi(\vec{p})=\int d\vec{r}\,<\vec{p}|\vec{r}>\psi(\vec{r})$,

asupra căreia vom reveni mai târziu.

Evident, conjugata complexă $\psi^*(\vec{p})$ are componentele

(5.31) $\psi^*(\vec{p}) = \langle \psi | \vec{p} \rangle$,

iar produsul scalar (5.14) se exprimă sub forma

(5.32) $\langle \psi | \varphi \rangle = \int d\vec{p}\ \psi^*(\vec{p}) \varphi(\vec{p})$.

Introducem operatorul vectorial $\hat{\vec{p}}$, ale cărui componente $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ se definesc prin relaţii analoage lui (5.15-17)

(5.33) $\langle \vec{p} | \hat{p}_x | \psi \rangle = p_x \langle \vec{p} | \psi \rangle$

(5.34) $\langle \vec{p} | \hat{p}_y | \psi \rangle = p_y \langle \vec{p} | \psi \rangle$

(5.35) $\langle \vec{p} | \hat{p}_z | \psi \rangle = p_z \langle \vec{p} | \psi \rangle$,

şi au elementele matricilor corespunzătoare, în reprezentarea $\{|\vec{p}\rangle\}$, de forma

(5.36) $\langle \vec{p} | \hat{p}_x | \vec{p}' \rangle = p_x \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

(5.37) $\langle \vec{p} | \hat{p}_y | \vec{p}' \rangle = p_y \delta(\vec{p} - \vec{p}')$

(5.38) $\langle \vec{p} | \hat{p}_z | \vec{p}' \rangle = p_z \delta(\vec{p} - \vec{p}')$,

adică

(5.39) $\langle \vec{p} | \hat{\vec{p}} | \vec{p}' \rangle = \vec{p}\, \delta(\vec{p} - \vec{p}')$.

Ecuaţiile de vectori şi valori proprii

(5.40) $\hat{p}_x | \vec{p} \rangle = p_x | \vec{p} \rangle$

(5.41) $\hat{p}_y | \vec{p} \rangle = p_y | \vec{p} \rangle$

(5.42) $\hat{p}_z | \vec{p} \rangle = p_z | \vec{p} \rangle$

pun în evidenţă faptul că $|\vec{p}\rangle$ sunt vectori proprii comuni ai operatorilor $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ corespunzând valorilor proprii p_x, p_y, p_z.

Putem afirma, ca şi în cazul reprezentării $\{|\vec{r}\rangle\}$, că fiecare vector propriu $|\vec{p}\rangle$ este specificat, în mod unic, de vectorul $\vec{p}$, ale cărui componente p_x, p_y, p_z sunt chiar valorile proprii ale operatorilor $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ ce formează, la rândul lor, un set complet de observabile, în reprezentarea de impuls.

BCU ARHICENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

C. TRECEREA DE LA O REPREZENTARE LA ALTA

Subiectul acestui paragraf îl constituie deducerea unor formule utile în cazul trecerii de la baza de coordonate la cea de impuls şi invers.

Utilizând relaţiile de ortogonalitate şi închidere şi dezvoltarea în serii Fourier a funcţiei δ, avem

$$(5.43)\quad \int d\vec{p}\,\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}') = (2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')},$$

adică

$$(5.44)\quad \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\vec{r}'\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\,(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}'}$$

de unde rezultă că trecerea de la o bază continuă la cealaltă se face cu ajutorul relaţiilor:

$$(5.45)\quad \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

$$(5.46)\quad \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}.$$

Un vector $|\psi\rangle$ oarecera are componentele (5.11) în baza $\{|\vec{r}\rangle\}$ şi (5.29) în baza $\{|\vec{p}\rangle\}$. Aplicând (5.45) şi (5.46), putem calcula componentele $\psi(\vec{r})$ în baza $\{|\vec{p}\rangle\}$ şi $\psi(\vec{p})$ în baza $\{|\vec{r}\rangle\}$, acestea fiind legate, aşa cum anticipam în (5.30), printr-o transformare Fourier. Astfel, utilizând relaţia de închidere, avem

$$(5.47)\quad \psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d\vec{p}\,\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\,\psi(\vec{p})$$

şi

$$(5.48)\quad \psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle = \int d\vec{r}\,\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{r}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}\,\psi(\vec{r}).$$

In aplicaţii este foarte importantă cunoaşterea formulelor de transformare a elementelor de matrice corespunzătoare unui operator, la

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

schimbarea reprezentării. Acestea pot fi deduse imediat, în felul următor:

$$\hat{A}(\vec{r},\vec{r}') \equiv \langle \vec{r}|\hat{A}|\vec{r}'\rangle = \int d\vec{p}\,d\vec{p}'\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\hat{A}|\vec{p}'\rangle\langle \vec{p}'|\vec{r}'\rangle =$$

(5.49)
$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{p}\,d\vec{p}'\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\vec{p}'\vec{r}')}\hat{A}(\vec{p},\vec{p}'),$$

$$\hat{A}(\vec{p},\vec{p}') \equiv \langle \vec{p}|\hat{A}|\vec{p}'\rangle = \int d\vec{r}\,d\vec{r}'\langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\hat{A}|\vec{r}'\rangle\langle \vec{r}'|\vec{p}'\rangle =$$

(5.50)
$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{r}\,d\vec{r}'\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}'\vec{r}'-\vec{p}\vec{r})}\hat{A}(\vec{r},\vec{r}').$$

Relaţiile (5.49) şi (5.50) fiind valabile pentru un operator $\hat{A}$ oarecare, pot fi aplicate şi în cazul operatorilor uzuali din fizică. Astfel, operatorii $\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z$, care au în reprezentarea $\{|\vec{p}\rangle\}$ componentele matriciale (5.36-38), vor avea în reprezentarea $\{|\vec{r}\rangle\}$ elementele

$$\langle \vec{r}|\hat{p}_x|\vec{r}'\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}\,d\vec{p}'\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\vec{p}'\vec{r}')}\langle \vec{p}|\hat{p}_x|\vec{p}'\rangle =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}\,d\vec{p}'\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\vec{p}'\vec{r}')}\, p_x\,\delta(\vec{p}-\vec{p}') =$$

(5.51)
$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}\, p_x =$$

$$= \left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_x e^{\frac{i}{\hbar}p_x(x-x')}\, p_x\right]\left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_y e^{\frac{i}{\hbar}p_y(y-y')}\right]\left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp_z e^{\frac{i}{\hbar}p_z(z-z')}\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z').$$

(5.52) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_y|\vec{r}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(x-x')\frac{\partial}{\partial y}\delta(y-y')\,\delta(z-z')$$

(5.53) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_z|\vec{r}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\delta(x-x')\,\delta(y-y')\frac{\partial}{\partial z}\delta(z-z');$$

care pot fi scrise comprimat ca

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.54) $$\langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{r}'\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\delta(\vec{r}-\vec{r}').$$

Tinând cont de ecuaţiile de vectori şi valori proprii (5.40-42), putem obţine următoarele rezultate importante:

$$\langle \vec{r}|\hat{p}_x|\psi\rangle = \int d\vec{p}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\hat{p}_x|\psi\rangle =$$

$$= \int d\vec{p}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\psi\rangle p_x =$$

(5.55) $$= \int d\vec{p}(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{p}) p_x =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\int d\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \psi(\vec{p}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})$$

(5.56) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_y|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\psi(\vec{r})$$

(5.57) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_z|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\psi(\vec{r}),$$

sau, scrise în forma comprimată

(5.58) $$\langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\vec{r}).$$

Pentru operatorul $\hat{\vec{r}}$, în reprezentare $\{|\vec{p}\rangle\}$, vom obţine relaţii analoage lui (5.51-53), adică

$$\langle \vec{p}|\hat{\vec{x}}|\vec{p}'\rangle = (2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{r}d\vec{r}' e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-\vec{p}'\cdot\vec{r}')} \langle \vec{r}|\hat{\vec{x}}|\vec{r}'\rangle =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{r} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{r}\cdot(\vec{p}-\vec{p}')} x =$$

(5.59) $$= \left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}x(p_x-p_x')} x\right]\left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{i}{\hbar}y(p_y-p_y')}\right]\left[\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{i}{\hbar}z(p_z-p_z')}\right] =$$

$$= -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p_x}\delta(p_x-p_x')\delta(p_y-p_y')\delta(p_z-p_z').$$

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.60) $$\langle \vec{p}|\hat{y}|\vec{p}'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\delta(p_x-P_x')\frac{\partial}{\partial p_y}\delta(p_y-p_y')\delta(p_z-p_z')$$

(5.61) $$\langle \vec{p}|\hat{z}|\vec{p}'\rangle = -\frac{\hbar}{i}\delta(p_x-p_x')\delta(p_y-p_y')\frac{\partial}{\partial p_z}\delta(p_z-p_z').$$

Un alt rezultat util în exemplele practice poate fi dedus imediat astfel

(5.62) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_x|\vec{p}\rangle = \int d\vec{p}'\langle \vec{r}|\vec{p}'\rangle\langle \vec{p}'|\hat{p}_x|\vec{p}\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{p}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\, p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$$

(5.63) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_y|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$$

(5.64) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_z|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle,$$

sau

(5.65) $$\langle \vec{r}|\hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle = \frac{\hbar}{i}\nabla\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle$$

şi el ne va permite să deducem relaţiile canonice de comutare

$$\langle \vec{r}|[\hat{x}_i,\hat{p}_j]|\vec{p}\rangle = \langle \vec{r}|(\hat{x}_i\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{x}_i)|\vec{p}\rangle =$$

(5.66) $$= \frac{\hbar}{i}x_i\frac{\partial}{\partial x_j}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_j}x_i\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle =$$

$$= i\hbar\delta_{ij}\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle,$$

adică

$$[\hat{x}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}.$$

Pentru a exprima ecuaţia Schrödinger în reprezentările $\{|\vec{r}\rangle\}$ şi $\{|\vec{p}\rangle\}$ să calculăm, utilizând ecuaţiile de vectori şi valori proprii (5.40-42), următoarele expresii:

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\langle \vec{r}|\hat{p}_x^2|\Psi(t)\rangle = \int d\vec{p}\langle \vec{r}|\hat{p}_x|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\hat{p}_x|\Psi(t)\rangle =$$

(5.67)
$$= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle \vec{r}|\Psi(t)\rangle \equiv -\hbar^2\frac{\partial}{\partial x^2}\Psi(\vec{r},t)$$

(5.68) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_y^2|\Psi(t)\rangle = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Psi(\vec{r},t)$$

(5.69) $$\langle \vec{r}|\hat{p}_z^2|\Psi(t)\rangle = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi(\vec{r},t)$$

(5.70) $\langle \vec{r}|\hat{V}(\vec{r})|\Psi(t)\rangle = V(\vec{r})\langle \vec{r}|\Psi(t)\rangle = V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$,
care ne conduc la elementul de matrice

(5.71)
$$\langle \vec{r}|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \langle \vec{r}|\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{\hat{p}_y^2}{2m}+\frac{\hat{p}_z^2}{2m}+V(\vec{r})\right)|\Psi(t)\rangle =$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t).$$

Explicitând operatorul hamiltonian în ecuaţia Schrödinger

(5.72) $$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle$$

proiectată pe vectorul $|\vec{r}\rangle$, adică

(5.73) $$\langle \vec{r}|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\langle \vec{r}|\Psi(t)\rangle,$$

obţinem ecuaţia Schrödinger dependentă de timp, în reprezentare de coordonate

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t),$$

care coincide, aşa cum ne aşteptam, cu (IV.6.18) pentru spaţiul tridimensional.

Pentru scrierea ecuaţiei Schrödinger în reprezentare de impuls vom efectua transformata Fourier a acestei relaţii, adică

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\frac{(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}}{2m}\int d\vec{p}\,|\vec{p}|^2\Psi(\vec{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} +$$

$$+(2\pi\hbar)^{-3}\int d\vec{p}\,d\vec{p}\,'V(\vec{p}\,')\Psi(\vec{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'+\vec{p})\cdot\vec{r}} =$$

$$=-\frac{\hbar}{i}(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{p}\,\frac{\partial\Psi(\vec{p},t)}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

pe care, înmulţind-o cu $e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{k}\cdot\vec{r}}$ şi integrând-o după $\vec{r}$

$$\int d\vec{p}\,d\vec{r}\,\frac{|\vec{p}|^2}{2m}\Psi(\vec{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{k})\cdot\vec{r}} +$$

$$+\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d\vec{p}\,d\vec{p}\,'d\vec{r}\,V(\vec{p}\,')\Psi(\vec{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\,'+\vec{p}-\vec{k})\cdot\vec{r}} =$$

$$=-\frac{\hbar}{i}\int d\vec{p}\,d\vec{r}\,\frac{\partial\Psi(\vec{p},t)}{\partial t}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{k})\cdot\vec{r}},$$

adică

$$\int d\vec{p}\,\frac{|\vec{p}|^2}{2m}\Psi(\vec{p},t)\delta(\vec{p}-\vec{k}) +$$

$$+\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d\vec{p}\,d\vec{p}\,'V(\vec{p}\,')\Psi(\vec{p},t)\,\delta(\vec{p}\,'-\vec{p}-\vec{k}) =$$

$$=-\frac{\hbar}{i}\int d\vec{p}\,\frac{\partial\Psi(\vec{p},t)}{\partial t}\delta(\vec{p}-\vec{k}),$$

o aducem la frorma

$$\frac{|\vec{p}|^2}{2m}\Psi(\vec{k},t)+\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d\vec{p}\,V(\vec{k}-\vec{p})\Psi(\vec{p},t)=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi(\vec{k},t)}{\partial t}, \tag{5.74}$$

ce exprimă ecuaţia Schrödinger dependentă de timp în reprezentarea de

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

impuls.

D. ACTIUNEA IN $\mathcal{E}$ A OPERATORILOR ASOCIATI SIMETRIEI FUNDAMENTALE *CPT*

Conjugarea de sarcină, paritatea şi inversiunea temporală, obţinute prin acţiunea operatorilor $\hat{C},\hat{P},\hat{T}$, au fost considerate mult timp ca fiind simetrii independente ale naturii. Deoarece, în 1957, experimentul lui Wu şi al. avea să confirme prezicerea lui Lee şi Yang (1956) asupra violării parităţii în interacţiunile slabe, s-a impus sistemelor cuantice cerinţa ca acestea să conserve *CP* şi *T* în toate tipurile de interacţiuni. După numai câţiva ani, în 1964, Christenson, Cronin, Fitch şi Turlay pun în evidenţă o nouă etapă în studiul interacţiunilor slabe. Astăzi, există premize teoretice de a observa violarea simetriei *CP* şi pentru alte sisteme, de exemplu B^0-$\overline{B}^0$, sau în dezintegrările hiperonilor. Putem deci afirma că, după 30 de ani, problema violării *CP* rămâne deschisă, o rezolvare a ei furnizând şi o posibilă explicaţie a evoluţiei Universului, după Big Bang, într-o lume dominată de materie.

In aceste condiţii, esenţială pentru orice teorie cuantică este respectarea

Teoremei CPT. Pentru orice sistem cuantic, Lorentz invariant şi care posedă proprietatea de microcauzalitate, *CPT* se conservă în toate interacţiunile.

In cele ce urmează, vom face o scurtă prezentare a operatorilor $\hat{C},\hat{P}$ şi $\hat{T}$, insistând asupra proprietăţilor mai importante ale lor.

(i) *Conjugarea de sarcină*

Prin acţiunea operatorului $\hat{C}$, o particulă, reprezentată prin funcţia de undă $|\psi>$, este dusă în antiparticula sa $|\overline{\psi}>$ şi invers, adică

$$\hat{C}|\psi>=|\overline{\psi}>$$
$$\hat{C}|\overline{\psi}>=|\psi>. \tag{5.75}$$

Aplicând de două ori operatorul $\hat{C}$, punem în evidenţă proprietatea acestuia

$$\hat{C}^2=\hat{1} \tag{5.76}$$

şi valorile sale proprii $\eta_A=\pm 1$. Mărimea η_A se numeşte paritate de sarcină şi ea se conservă în interacţiunile electromagnetice şi tari, dar nu se conservă în cele slabe.

(ii) *Paritatea*

Se defineşte ca fiind o reflexie spaţială, adică operaţia prin care se inversează direcţia axelor de coordonate

$$\hat{P}:\vec{r}\to -\vec{r}. \tag{5.77}$$

Prin vector se înţelege mărimea care se comportă, sub acţiunea operatorului de paritate, la fel ca şi $\vec{r}$, adică

$$\hat{P}:\vec{v}\to -\vec{v}. \tag{5.78}$$

Produsul $\vec{v}x\vec{w}$, păstrându-şi semnul la acţiunea lui $\hat{P}$, este un pseudovector. De exemplu, momentul cinetic orbital este un pseudovector, deoarece

$$\hat{P}:\vec{r}x\vec{p}\to\vec{r}x\vec{p}. \tag{5.79}$$

Este uşor de verificat că

$$\hat{P}:\vec{v}\cdot\vec{w}\to\vec{v}\cdot\vec{w} \tag{5.80}$$

şi

$$\hat{P}:\vec{v}\cdot(\vec{w}x\vec{u})\to -\vec{v}\cdot(\vec{w}x\vec{u}), \tag{5.81}$$

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţia (5.80) definind un scalar iar (5.81), un pseudoscalar.

Pentru cazul unui microsistem, cu spaţiul liniar abstract $\mathcal{E}$ al stărilor sale cuantice, acţiunea operatorului $\hat{P}$ asupra bazei $\{|\vec{r}>\}$ a lui $\mathcal{E}$ se defineşte prin relaţia

(5.82) $\hat{P}|\vec{r}>=|-\vec{r}>$,

iar asupra bazei $\{|\vec{p}>\}$, prin

$$\hat{P}|\vec{p}>=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{r}'e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}'}\hat{P}|\vec{r}'>=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{r}'e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}'}|-\vec{r}'>,$$

de unde, efectuând schimbarea de variabilă $\vec{r}'=-\vec{r}$, obţinem

(5.83) $\hat{P}|\vec{p}>=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int d\vec{r}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}|\vec{r}>=|-\vec{p}>$.

Atragem atenţia că, în (5.82), $|-\vec{r}>$ reprezintă vectorul propriu al lui $\hat{r}$ corespunzător valorii proprii $-\vec{r}$ şi nu trebuie confundat cu vectorul $-|\vec{r}>$. Aceeaşi observaţie şi în cazul bazei $\{|\vec{p}>\}$.

Pentru un vector oarecare $|\psi>\in\mathcal{E}$, scris în dezvoltare după baza $\{|\vec{r}>\}$ sub forma (5.12), acţiunea lui $\hat{P}$ se determină imediat ca fiind

(5.84) $\hat{P}|\psi>=\int d\vec{r}'\psi(\vec{r}')\hat{P}|\vec{r}'>=\int d\vec{r}'\psi(\vec{r}')|-\vec{r}'>=\int d\vec{r}\psi(-\vec{r})|\vec{r}>$,

adică

(5.85) $<\vec{r}|\hat{P}|\psi>=\psi(-\vec{r})=<-\vec{r}|\psi>$

de unde rezultă, de asemenea, că

(5.86) $<\vec{r}|\hat{P}=<-\vec{r}|$.

Aplicând a doua oară $\hat{P}$ asupra lui (5.82) sau (5.83), adică

(5.87) $\hat{P}^2|\vec{r}>=\hat{P}(\hat{P}|\vec{r}>)=\hat{P}|-\vec{r}>=|\vec{r}>$

sau

(5.88) $\hat{P}^2|\vec{p}>=\hat{P}(\hat{P}|\vec{p}>)=\hat{P}|-\vec{p}>=|\vec{p}>$,

BUCHAREST UNIVERSITY LIBRARY

vom obţine o proprietate importantă a operatorului $\hat{P}$ şi anume

(5.89) $\hat{P}^2 = \hat{1}$

sau

(5.90) $\hat{P} = \hat{P}^{-1}$.

Pe de altă parte, comparând pe (5.86) cu conjugata hermitică a relaţiei (5.82), adică cu

(5.91) $<\vec{r}|\hat{P}^+ = <-\vec{r}|$,

obţinem că operatorul $\hat{P}$ este autoadjunct şi unitar

(5.92) $\hat{P} = \hat{P}^+ = \hat{P}^{-1}$.

Fie $\hat{A}$ un operator oarecare supus transformării unitare

(5.93) $\hat{A}' = \hat{P}\hat{A}\hat{P}$.

Dacă $\hat{A}' = \hat{A}$, adică $\hat{P}\hat{A} = +\hat{A}\hat{P}$ sau $[\hat{A},\hat{P}]=0$, atunci operatorul $\hat{A}$ este par.

Dacă $\hat{A}' = -\hat{A}$, adică $\hat{P}\hat{A} = -\hat{A}\hat{P}$ sau $\{\hat{A},\hat{P}\}=\hat{A}\hat{P}+\hat{P}\hat{A}=0$, atunci operatorul $\hat{A}$ este impar.

Se observă că operatorul $\hat{P}$, comutând cu el însuşi, este un operator par, ecuaţia de vectori şi valori proprii fiind

(5.94) $\hat{P}|\varphi> = \eta|\varphi>$,

de unde, utilizând

$$|\varphi> = \hat{P}^2|\varphi> = \eta^2|\varphi>,$$

rezultă că valorile proprii ale lui $\hat{P}$ sunt $\eta_{1,2} = \pm 1$. Vectorul propriu $|\varphi_1\rangle$, aparţinând valorii proprii $\eta_1 = +1$ este par, iar vectorul propriu $|\varphi_2\rangle$, aparţinânde valorii proprii $\eta_2 = -1$, este impar.

Se poate demonstra fără dificultate că, pentru toate valorile proprii

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

nedegenerate ale unui operator par $\hat{A}$, vectorii săi proprii (fiind vectori proprii şi ai lui $\hat{P}$) vor fi obligatoriu de paritate bine definită. In cazul valorilor proprii degenerate $\{\alpha\}$ ale lui $\hat{A}$, dat fiind că, în general, o combinaţie liniară de vectori cu paritate bine definită nu este un vector de paritate bine definită, rezultă că un vector propriu (oarecare), din subspaţiul α-caracteristic va fi (în general) de paritate indefinită. Exact din acest motiv, este recomandabilă, în aplicaţii, alegerea bazelor ortonormale de paritate bine definită, în fiecare din subspaţiile α-caracteristice corespunzătoare valorilor proprii degenerate ale lui $\hat{A}$.

Să considerăm, în continuare, câteva exemple de operatori şi să verificăm comutativitatea sau anticomutativitatea acestora cu $\hat{P}$.

Astfel, operatorul coordonată $\hat{x}$ este impar deoarece

$$\hat{P}\hat{x}|\vec{r}\rangle = x\hat{P}|\vec{r}\rangle = x|-\vec{r}\rangle$$
(5.95)
$$\hat{x}\hat{P}|\vec{r}\rangle = \hat{x}|-\vec{r}\rangle = -x|-\vec{r}\rangle,$$

adică

(5.96) $\hat{P}\hat{x} = -\hat{x}\hat{P}$.

In mod analog rezultă

(5.97) $\hat{P}\hat{y} = -\hat{y}\hat{P}$

(5.98) $\hat{P}\hat{z} = -\hat{z}\hat{P}$

şi deci putem scrie

(5.99) $\{\hat{P},\hat{r}\} = 0$.

Se pot construi, însă, expresii ale energiei potenţiale $\hat{V}(\vec{r})$ care să fie operatori pari, cum ar fi, de exemplu, cele de forma $\hat{V}(\vec{r}) = k\vec{r}^2$, pentru care

(5.100) $$\hat{P}\vec{r}^2|\vec{r}\rangle = \vec{r}^2\hat{P}|\vec{r}\rangle .$$

Utilizând relaţia (5.83), se poate verifica imediat că

BCUJASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\hat{P}\hat{p}_x|\vec{p}>=p_x\hat{P}|\vec{p}>=p_x|-\vec{p}>$$

(5.101)

$$\hat{p}_x\hat{P}|\vec{p}>=\hat{p}_x|-\vec{p}>=-p_x|-\vec{p}>,$$

adică

(5.102) $$\hat{P}\hat{p}_x=-\hat{p}_x\hat{P}$$

şi, de asemenea

(5.103) $$\hat{P}\hat{p}_y=-\hat{p}_y\hat{P}$$

(5.104) $$\hat{P}\hat{p}_z=-\hat{p}_z\hat{P}.$$

Deci, operatorul $\hat{\vec{p}}$ este impar, fiind valabilă relaţia

(5.105) $$\{\hat{P},\hat{\vec{p}}\}=0.$$

Ca şi în cazul anterior, se poate demonstra cu uşurinţă că $\hat{p}^2$ este par.

In concluzie, operatorul hamiltonian

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+\hat{V}(\vec{r}),$$

cu $\hat{V}(\vec{r})$ operator par, va fi un operator par, adică

(5.106) $$[\hat{H},\hat{P}]=0.$$

Operatorul paritate $\hat{P}$, cu proprietăţile (5.89) şi (5.92) ne permite definirea următorilor operatori cu mare aplicabilitate în fizică:

(5.107) $$\hat{P}_+=\frac{1}{2}(\hat{1}+\hat{P})$$

(5.108) $$\hat{P}_-=\frac{1}{2}(\hat{1}-\hat{P}).$$

Evident, ei sunt autoadjuncţi şi, având proprietatea

(5.109) $$\hat{P}_+^2=\hat{P}_+\ ;\quad \hat{P}_-^2=\hat{P}_-,$$

sunt proiectori.

Vectorul

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.110) $$|\psi_+\rangle = \hat{P}_+ |\psi>,$$

reprezentând proiecţia vectorului $|\psi>$ pe subspaţiul $\mathscr{E}_+$,este par deoarece

(5.111) $$\hat{P}|\psi_+\rangle = \hat{P}\hat{P}_+|\psi> = \frac{1}{2}(\hat{P}+\hat{1})|\psi> = \hat{P}_+|\psi> = |\psi_+\rangle,$$

iar vectorul

(5.112) $$|\psi_-\rangle = \hat{P}_-|\psi>,$$

reprezentând proiecţia vectorului $|\psi>$ pe subspaţiul $\mathscr{E}_-$, este impar deoarece

(5.113) $$\hat{P}|\psi_-\rangle = \hat{P}\hat{P}_-|\psi> = \frac{1}{2}(\hat{P}-\hat{1})|\psi> = -\hat{P}_-|\psi> = -|\psi_-\rangle.$$

In plus, deoarece

(5.114) $$\hat{P}_+\hat{P}_- = \hat{P}_-\hat{P}_+ = 0$$

şi

(5.115) $$\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \hat{1},$$

rezultă că subspaţiile $\mathscr{E}_+$ şi $\mathscr{E}_-$ sunt ortogonale şi suplementare. Astfel, orice vector $|\psi> \in \mathscr{E}$ va putem fi scris ca o sumă de doi vectori proprii ai lui $\hat{P}$ sub forma

(5.116) $$|\psi> = \left(\hat{P}_+ + \hat{P}_-\right)|\psi> = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle,$$

unde $|\psi_+\rangle \in \mathscr{E}_+$ iar $|\psi_-\rangle \in \mathscr{E}_-$. Deci, având un set complet de vectori proprii în spaţiul în care acţionează, $\hat{P}$ este o observabilă.

In încheierea acestei succinte prezentări a operatorilor $\hat{C}$ şi $\hat{P}$, să definim acţiunea lor combinată asupra unei funcţii de undă $|\psi>$ care, reprezentând o particulă pseudoscalară, se transformă ca

(5.117) $$\hat{P}|\psi> = -|\psi>,$$

antiparticula acesteia având funcţia de undă $|\overline{\psi}>$ cu proprietatea

BCU ASE CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(5.118) $\hat{P}|\overline{\psi}> = -|\overline{\psi}>$.

Utilizând relaţiile (5.75) şi (5.117), respectiv (5.118), obţinem

(5.119) $\hat{C}\hat{P}|\psi> = -|\overline{\psi}>$

şi respectiv

(5.120) $\hat{C}\hat{P}|\overline{\psi}> = -|\psi>$.

Dacă stările $|\psi>$ şi $|\overline{\psi}>$ sunt legate prin intermediul unui hamiltonian de interacţiune slabă, adică $<\overline{\psi}|H|\psi>$, unde în (H) elementele nediagonale sunt în relaţia (3.15), atunci se obţine un amestec inegal al stărilor $|\psi>$ şi $|\overline{\psi}>$ şi se poate pune în evidenţă o violare a simetriei CP. Asupra acestei probleme am insistat în paragraful 3 al acestui capitol.

(iii) *Inversiunea temporală*

Aceasta are rolul de a inversa direcţia axei timpului

(5.121) $\hat{T}: t \to -t$,

adică de a schimba între ele stările iniţială şi finală. Acţiunea operatorului $\hat{T}$ asupra vectorului $|\psi> \in \mathcal{E}$ este deci

(5.122) $\hat{T}|\psi> = <\psi|$,

iar asupra lui $<\psi|$ este

(5.123) $<\psi|\hat{T} = |\psi>$.

Evident, o violare a simetriei CP conduce la o violare a simetriei T, păstrându-se însă invarianţa CPT a oricărui sistem cuantic.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

VI.6. Postulatele Mecanicii Cuantice

In decursul evoluţiei sale, prin dezvoltarea formalismului ***bra-ket***, Mecanica Cuantică atinge un grad de elevare deosebită care, practic, nu numai că permite dar şi conduce la posibilitatea formulării axiomatice a acesteia [21], [31], [32], [43] bazată pe următorul set de postulate.

I. ***Postulatul de existenţă a stărilor cuantice***

In orice moment t, starea unui sistem fizic este reprezentată de un ket $|\psi(t)>$ din spaţiul liniar abstract $\mathcal{E}$ al tuturor stărilor posibile ale sistemului.

II. ***Postulatul de asociere de observabile mărimelor fizice***

Fiecărui atribut principial măsurabil al unui microsistem i se asociază un operator autoadjunct ce acţionează în spaţiul $\mathcal{E}$ al stărilor.

III. ***Postulatul de măsurare a valorilor proprii ale unei observabile***

Rezultatele posibile în măsurarea mărimii fizice A nu pot fi decât valorile proprii $\{\alpha_n\}$ ale observabilei $\hat{A}$ asociată acesteia.

IV. ***Postulatul posibilităţii de apariţie a valorii proprii a unei observabile***

(Spectru discret) *Testând observabila A pentru un sistem în starea normată $|\psi>$, probabilitatea $\mathcal{P}(\alpha_n)$, de a obţine ca rezultat valoarea proprie α_n a lui $\hat{A}$, are expresia*

$$\mathcal{P}(\alpha_n) = \sum_{\mu=1}^{g_n} |<n\mu|\psi>|^2,$$

unde $\{|n\mu>\}_{\mu=\overline{1,g_n}}$ este o bază ortonormală, în subspaţiul

α_n - *caracteristic de dimensiune* g_n *(gradul degenerării valorii proprii* α_n*).*

(Spectru continuu) *Testând observabila A pentru un sistem în starea normată* $|\psi>$, *probabilitatea* $d\wp(\alpha)$, *de obţinere a unui rezultat cuprins între* α *şi* $\alpha + d\alpha$, *este*

$$d\wp(\alpha) = |<\alpha|\psi>|^2 d\alpha ,$$

unde $|\alpha>$ *este vectorul propriu corespunzător valorii proprii* α *a lui* $\hat{A}$.

V. ***Postulatul de proiectare normată pe subspaţiul unei valori proprii*** *Dacă testarea observabilei A a unui sistem în starea* $|\psi>$ *are ca rezultat valoarea* α_n, *starea sistemului imediat după măsurătoare este proiecţia normată*

$$|\psi_n\rangle = \left(<\psi|\hat{\Pi}_n|\psi>\right)^{-\frac{1}{2}} \hat{\Pi}_n|\psi>$$

a lui $|\psi>$ *pe subspaţiul* $\mathscr{E}_n(\hat{A})$.

Inainte de enunţarea ultimului postulat, reamintim, datorită importanţei sale

Principiul corespondenţei ca regulă de cuantificare

Oricărei mărimi fizice $A(q,p)$ *a unui sistem descris de variabilele canonic conjugate* (q,p) *i se asociază un operator autoadjunct* $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ *obţinut prin înlocuirea, în expresia convenabil simetrizată a lui* $A(q,p)$, *a variabilelor canonic conjugate* (q,p) *cu operatorii corespunzători acestora* $(\hat{q},\hat{p})$.

BCU MATEMATICĂ CENTRALĂ UNIVERSITY LIBRARY

VI. *Postulatul de evoluţie a stărilor cuantice*

Intre două măsurători, dinamica vectorului de stare $|\psi(t)>$ *este guvernată de Ecuaţia de Evoluţie*

$$\hat{H}|\psi(t)> = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)>,$$

unde $\hat{H}=\hat{H}(\hat{q},\hat{p},t)$ *este observabila asociată energiei totale a sistemului* $H(q,p,t)$.

Din acest postulat rezultă că precizarea, la momentul iniţial t_0, a stării $|\psi(t_0)>$ a sistemului este suficientă pentru determinarea stării $|\psi(t)>$ la orice moment ulterior t, adică, între două măsurători, vectorul de stare evoluează într-o manieră perfect deterministă. Indeterminismul nu apare decât datorită procesului de măsurare când vectorul de stare, prin colapsare, suferă o modificare imprevizibilă (conform postulatului V). Pentru ca starea unui sistem fizic să fie unic determinată, prin rezultatele obţinute în cadrul procesului de măsurare, trebui ca acesta să acţioneze la nivelul setului complet de observabile ale sistemului.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

BIBLIOGRAFIE

1. Akhiezer, N.I., Glazman, I.M. (1961). *Theory of linear operators in the Hilbert space*. M. Nestell (Translation). Ungar, New York.
2. Antoine, J.P. (1969). *J. Math. Phys.*, **10**, 53.
3. Birkhoff, G., MacLane, S. (1953). *A survey of modern algebra*. Macmillan, New York.
4. Bohr, N. (1929). *Wirkungsquanten und Naturbeschreibung. Die Naturwissenschaften*, **17**, 483.
5. Born, M. (1926). *Zeitschr. Phys.*, **37**, 863.
6. Born, M. (1926). *Zeitschr. Phys.*, **38**, 803.
7. Cheng, T.P., Li, L.F. (1984). *Gauge theory of elementary particle physics*, Clarendon Press, Oxford.
8. Christenson, J.H., Cronin, J.W., Fitch, V.L., Turlay, R. (1964). *Phys. Rev. Lett.*, **13**, 138.
9. Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F. (1977). *Mécanique quantique*. Tome **I**. Collection Enseignement des sciences. Hermann, Paris.
10. Constantinescu, F., Magyari, E. (1968). *Mecanică cuantică. Probleme*. Editura Tehnică, Bucureşti.
11. Craiu, Mariana, Tănase, V.V. (1980). *Analiză matematică*. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
12. Cristescu, R. (1979). *Analiză funcţională*. Ediţia III. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
13. de Broglie, L. (1924). *Thése de doctorat*. Mason, Paris.
14. de Broglie, L. (1924). *Phil. Mag.*, **4F**, 446.
15. de Broglie, L. (1925). *Ann. de Phys.*, **3**, 22.
16. de Broglie, L. (1928). *Rapports et discussions du V-e Conseil Solvay de physique*. Gauthier- Villars, Paris.

BCU CLUJ / UNIVERSITY LIBRARY

17. de Broglie, L. (1937). *La physique nouvelle et les quanta*. Ernest Flammarion, Paris.
18. de Broglie, L. (1956). *Nouvelles perspectives en microphysique*. Albin Michel, Paris.
19. de Broglie, L. (1980). *Certitudinile şi incertitudinile ştiinţei*. Editura Politică, Bucureşti.
20. Dirac, P.A.M. (1928). *Proc. Roy. Soc.*, **117**, 610.
21. Dirac, P.A.M. (1930). *The principles of quantum mechanics*. Oxford University Press (Clarendon), London and New York.
22. Dixmier, J. (1952). *Les algèbres d'opérateurs dans l'espace hilbertien*, Gauthier-Villars, Paris.
23. Einstein, A., Infeld, L. (1957). *Evoluţia fizicii*. Editura Tehnică, Bucureşti.
24. Feynman, R.P. (1969). *Fizica modernă*. Vol. **I**, Editura Tehnică, Bucureşti.
25. Gottlieb, I. (1973). *Mecanică cuantică*. Centrul de multiplicare al Univ. *Al.I. Cuza* Iaşi.
26. Gottlieb, I. (1982). *Mecanică cuantică*. Fascicola **1**. Centrul de multiplicare al Univ. *Al.I. Cuza* Iaşi.
27. Haimovici, A. (1966). *Ecuaţiile fizicii matematice*. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
28. Heisenberg, W. (1927). *Zeitschr. Phys.*, **43**, 172.
29. Heisenberg, W. (1930). *Die physikalischen Prinzipien der Quantenmechanik*. Hirzel, Berlin.
30. Heisenberg, W. (1955). în *Niels Bohr and the development of physics*. Mc Graw-Hill P.C., New York.
31. Jauch, J.M. (1964). *Helv. Phys. Acta*, **37**, 293.
32. Jauch, J.M. (1968). *Foundations of quantum mechanics*, Addison-Wesley Reading, Massachusetts.
33. Kalik, C. (1980). *Ecuaţii cu derivate parţiale*. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
34. Kastler, A. (1982). *Această stranie materie*. Seria Idei Contemporane. Editura Politică, Bucureşti.
35. Kato, T. (1951). *Trans. Amer. Math. Soc.*, **70**, 196.

36. Kato, T. (1967). *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **40**, 3.
37. Kolmogorov, A.N., Fomin, S.V. (1961). *Measure, Lebesgue Integrals and Hilbert space*. N.A. Brunswich and A. Geffrey (Translation). Academic Press, New York.
38. Kufner, A., John, O., Fucik, S. (1977). *Function spaces*. Acad. Publ. H, Prague.
39. Landau, L.D., Lifchitz, E.M. (1966). *Mecanica*. Editura Tehnică, Bucureşti.
40. Landau, L.D., Lifchitz, E.M. (1973). *Théorie des champs*. Physique théorique **II**. MIR, Moscou.
41. Landau, L.D., Lifchitz, E.M. (1980). *Mécanique quantique*. (Théorie non relativiste). Physique théorique **III**. MIR, Moscou.
42. Lions, J.L., Magenes, E. (1968). *Problèmes aux limites non homogènes et applications*. Edition Dunod, Paris.
43. Messiah, A. (1962). *Quantum mechanics*. G. Potter (Translation). Wiley, New York.
44. Necăs, J. (1967). *Les méthodes directes du théorie des équations elliptiques*. Academia, Prague.
45. Newton, I. (1970). *Optica*. Editura Academiei RSR, Bucureşti.
46. Peebles, P.J.E. (1992). *Quantum mechanics*. Princeton University Press, New Jersey and Oxford.
47. Planck, M. (1925). *De la relativ la absolut*. Severnîi peceatnic, Vologdo.
48. Popescu, V. (1988). *Control optimal pentru ecuaţii de evoluţie*. Seria Analiză modernă şi aplicaţii. Editura Academiei RSR, Bucureşti.
49. Prugovečki, E. (1971). *Quantum mechanics in Hilbert space*. S. Eilenberg and H. Bass (Eds.), Academic Press, New York.
50. Reed, M., Simon, B. (1972). *Methods of modern mathematical physics I : Functional analysis*. Academic Press, New York and London.
51. Riesz, F., Nagy, Sz.B. (1955). *Functional analysis*. L.F. Boron (Translation). Ungar, New York.
52. Schrödinger, E. (1926). *Ann. Phys.*, **79**, 361.
53. Schrödinger, E. (1926). *Ann. Phys.*, **79**, 489.

54. Schrödinger, E. (1926). *Ann. Phys.*, **79**, 734.
55. Schrödinger, E. (1926). *Ann. Phys.*, **80**, 437.
56. Schrödinger, E. (1926). *Ann. Phys.*, **81**, 237.
57. Schrödinger, E. (1928). *Abhandlungen zur Wellenmechanik*. A. Barth (Ed.), Leipzig.
58. Smirnov, V.I. (1955). *Curs de matematici superioare*. Partea **II**. Vol. **III**. Editura Tehnică, Bucureşti.
59. Sobolev, S.L. (1950). *Nekotorîe primenenia functionalnovo analiza v matematiceskoi fizike*. Editura Universităţii, Leningrad.
60. Sobolev, S.L. (1955). *Ecuaţiile fizicii matematice*. Editura Tehnică, Bucureşti.
61. Sokolov, A.A., Ternov, I.M., Zhukovskii, V.Ch. (1984). *Quantum mechanics*. MIR, Moscow.
62. Stănăşilă, O. (1981). *Analiză matematică*. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
63. Stepanov, V.V. (1955). *Curs de ecuaţii diferenţiale*. Ediţia VI. Editura Tehnică, Bucureşti.
64. Stummel, F. (1956). *Math. Ann.*, **132**, 150.
65. Şabac, I.Gh. (1981). *Matematici speciale*. Vol. **I**. Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti.
66. Vladimirov, V.S. (198). *Ecuaţiile fizicii matematice*. Editură Stiinţifică şi Enciclopedică, Bucureşti.
67. von Laue, M. (1963). *Istoria fizicii*. Editura Stiinţifică, Bucureşti.
68. Wienholtz, E. (1958). Math. Ann., **135**, 50.
69. Avram, N.M., Drăgănescu, G.E. (1989). *Mecanică Cuantică. Probleme*, Editura Univ. Timişoara.
70. Cotăescu, I.I. (1990). *Curs de Mecanică Cuantică*, Editura Univ. Timişoara.
71. Florescu, Viorica. *Mecanică Cuantică*, Vol.I (1979), Vol.II (1981), Tipografia Univ. Bucureşti.
72. Ţiţeica, Ş. (1984). *Mecanică Cuantică*. Editura Academiei RSR, Bucureşti.
73. Zăgănescu, M. (1972). *Mecanică Cuantică* (2 Volume + 2 Volume Anexe), Tipografia Univ. Timişoara.

INDEX ALFABETIC

abatere standard 439
acţiunea particulei libere 35
algebra Lie 395
- - ataşată 395
- - a unui grup Lie 395
- liniară 395
- operatorilor liniari 308
aplicaţie homeomorfă 389
- izomorfă 389
aproape peste tot 284
automorfism 389
axiomele formalismului bra-ket 470

baza 257
- ortogonală 268
- spaţiului liniar 255

calcul variaţional 9
centrul unui grup 389
componentele unui vector 256
comutator 232, 394
condiţia de normare 189, 190
condiţii semiclasice de cuantificare 96, 97, 106
conjugare de sarcină 548
constanta lui Planck 54, 61
- - Rydberg 93
- structurii fine 123
constante de structură 390
coordonate ciclice 22
- generalizate 11
- unghiulare 102
coordonatele unui vector 250
corecţia relativistă a lui Sommerfeld 125
corp absolut negru 44

degenerare 118
densitatea curentului de probabilitate 194
- spectrală a emitanţei energetice 41
- - a energiei radiante volumice 40, 54
- - a luminiscenţei energetice 41
derivata funcţională 11, 15
- generalizată 339
- matricilor 488, 492
- totală în raport cu timpul a unui operator 420

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

destrămarea pachetului de unde 173
dimensiunea unei reprezentări 390
- unui grup 388
- - spaţiu liniar 255
distribuţia Bose-Einstein pentru fotoni 55
domeniul spectral al unui operator 376

ecuaţia caracteristică 522
- de continuitate 194
- de evoluţie 227
- de valori şi vectori proprii 520
- Hamilton-Jacobi 28, 29
- lui Einstein a efectului fotoelectric 68
- Schrödinger atemporală 182
- - în reprezentarea de impuls 546
- - temporală 184
ecuaţiile canonice 24, 494
- Euler 11
- Euler-Lagrange 14
efectul Compton 132
elemente independente ale unui grup 388
emitanţa energetică 41
endomorfism 389
energia de ionizare a atomului de hidrogen 146, 147
energia de zero a oscilatorului liniar 450
- ionului hidrogenoid 113, 117
- medie a unui oscilator 53, 54
- potenţială 20
- radiantă volumică 40
experienţa Davisson-Germer 150
expresia semiclasică a funcţiei de undă 213
extensiunea unui operator liniar 308

factor spectral de absorbţie 42
formula lui Balmer 81
- - Compton 134, 137
- - Glauber 491
- - Moseley 131
- - Rutherford 79, 80
- spectrală 384
forţă conservativă 20
fotoni 68
funcţia caracteristică 285
- de undă a particulei încutiate 246
- - - a particulei libere 213
- Lagrange uniparticulă 16, 18
funcţie simplă 286
funcţionala acţiune 12

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

generatorii grupului Lie 394
- unui grup 388
gradul degenerării 118
graficul unui operator 310
grup 386
- abelian 388
- al automorfismelor 390
- general liniar 515
- Lie 391
- ortogonal 515
- semisimplu 389
- simplu 389
- special liniar 515
- - unitar 391, 510
- unitar 515

hamiltonian 23

impuls generalizat 22
- mecanic 21
impulsul fotonului 135
închiderea unui operator liniar 361
independenţa liniară 254
inegalitatea Cauchy-Schwarz-Buniakowski 265
- lui Bessel 276
integrale de fază 101
- Lebesgue 286
interpretarea probabilistă a funcţiei de undă 187, 188, 189
invariant adiabatic 101
invarianţa adiabatică 97
inversul unui operator 322
ipoteza lui Planck 55
ipotezele lui de Broglie 144, 145

legea de deplasare a lui Wien 46, 60
- lui Kirchhoff 42
- - Wien 48
- Rayleigh-Jeans 49, 56
- semiempirică a lui Wien 50, 56
- Stefan-Boltzmann 45, 48, 58
legile efectului fotoelectric 61, 62, 63
limita în medie a unui şir 298
luminiscenţa energetică 40
lungimea de undă Compton 137

marginile unui spectru 370
măsura spectrală 371, 385
- unei mulţimi 281
măsurarea unei mulţimi 405
matricile coordonată şi impuls 487
- lui Pauli 516
- unitare 490
metoda WKB 218

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

modelul de Broglie al particulei 153
- lui J. J. Thomson al atomului 71
- planetar al atomului 80
moment cinetic orbital 430
mulţime densă 274

nivelul fundamental în atomul de hidrogen 452
norma 268
- euclidiană 269
- indusă de produsul scalar 269
- unui operator 300
nucleul homomorfismului 390
număr cuantic azimutal 116, 117
- - principal 91, 116, 117
- - secundar 117

observabila 405, 424, 530
- forţă 428
- impuls total 427
- moment al forţei 430
observabile comensurabile 441
- incomensurabile 441
operator 299, 308
- adjunct 312, 314
- autoadjunct 328
- Cayley 332
- compact 300
- complet continuu 300, 375
operator continuu 300
- coordonată 343
- de proiecţie 382
- energie 226
- esenţial autoadjunct 361, 365
- Hamilton 227, 361
- Hamilton-Schrödinger 355
- hermitic 328
- identitate 477
- impar 550
- impuls 226, 346
- închis 310
- inversabil 322
- izometric 319
- liniar 304
- mărginit 299
- par 550
- reciproc adjunct 315
- simetric 328
- unitar 321
- viteză 426
orbite electronice staţionare în ioni hidrogenoizi 117, 118
- staţionare 90
ordinul unui grup 388
oscilatorul liniar armonic 494

paranteza Poisson 231
paritatea 548
particula încutiată 241
postulatele lui Bohr 91
- mecanicii cuantice 555
potenţial generalizat 16, 17
- simplu 19

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

principiul de corespondenţă 230
- de incertitudine 441
- lui Hamilton 13
probabilitatea de realizare a unei stări proprii 410
procedeul Gramm-Schmidt 270
produs direct de grupuri 388
- scalar 265, 468
- - de funcţii 296
proiector 478

rază Bohr 91, 92
relaţia de închidere 478
- lui Parseval 277
- lui Weyl 402
relaţii de comutare ale lui Heisenberg 232
- - - canonice 402
- de imprecizie 434, 440
- - - impuls-coordonată 443
- de nedeterminare 443
reprezentarea adjunctă 396
- de configuraţie 228, 536
- de impuls 539
- matricială a unui operator 482
- spectrală a unui operator 530
- unui grup 390, 513
reprezentări contragradiente 391
- echivalente 390
- ireductibile 391
- reductibile 391
reprezentări unitare 391, 573
- - ale grupurilor Lie 393
restricţia unui operator la un subspaţiu 481

secţiunea diferenţială eficace a împrăştierii 79
semnificaţia funcţiei de undă 190
serii spectrale 82, 83
set complet de observabile 533, 535
şir 272
- Cauchy 273
- convergent 272
- - în medie 297
- fundamental 273
- - în medie 297
sistem generator 255, 257
- ortogonal de vectori 266
- ortonormat 269
- total 278
sistemul ecuaţiilor de mişcare 12
- fundamental al ecuaţiilor de câmp 11
spaţii liniare izomorfe 262
spaţiu Banach 274
- de convergenţă 272
- euclidian 266
- Hilbert 274
- liniar 253
- - complet 274
- normat 269
- prehilbertian 274

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

spaţiu separabil 274
- Sobolev 338
- - restricţionat 340
spectrul unui operator 381, 520
starea fundamentală a atomului de hidrogen 453
- unui sistem 534
stări cuantice coerente 462
- - comprimate 463
structura fină a liniei H_α 128
subgrup 388
- invariant 389
subspaţii complementar ortogonale 268
- ortogonale 268
subspaţiu caracteristic al unei valori proprii 318
- complementar 262
- liniar 258, 261
sumă directă de subspaţii 262

tensorul masei 18
teorema CPT 547
- de închidere 408
- lui Jacobi 30
teoremele lui Ehrenfest 422
teoria dublei soluţii 168
- undei pilot 168
termeni spectrali 83
transformări de bază 501, 505
- de matrici 500

unde de probabilitate 190

valoare medie a unei mărimi 415
- - - - observabile 416
- proprie a unui operator 318, 520
variabilă adiabatică 99
variabile canonic conjugate 23
variaţia în timp a valorii medii a unei observabile 419
variaţie adiabatică 98
vector bra 467
- ket 466
- propriu 318, 520
vectori liniar independenţi 254
- ortogonali 266
viteza undelor de Broglie 146, 147

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prof.dr.Ioan Gottlieb

Născut la data de 21 Ianuarie 1929, în Baia Mare, judeţul Maramureş Licenţiat în matematică al Universităţii "Bolyai" din Cluj în anul 1951 Doctor în ştiinţe fizico-matematice al Universităţii "Al.I.Cuza" - Iaşi, din anul 1962 Şef al Catedrei de Fizică Teoretică şi Structura Materiei în perioada 1964-1971 şi şef al Catedrei de Fizică Teoretică din 1990 până în prezent. Contribuţii în domeniile Teoriei Relativităţii Generale, Mecanicii Cuantice şi Geometriei Diferenţiale concretizate într-un număr de peste 100 de lucrări ştiinţifice de specialitate.

Membru al International Society on General Relativity and Gravitation, American Mathematical Society, Janos Bolyai Mathematical Society, European Academy for Sciences and Arts şi fondator al Societăţii Române de Gravitaţie şi Relativitate Generală. Titular din anul 1958 al cursului de Mecanică Cuantică de la Facultatea de Fizică a Universităţii "Al.I.Cuza"-Iaşi. Conducător de doctorat din 1971 în Fizică Teoretică.

Conf.dr. Ciprian Dariescu

Născut în Iaşi la data de 26 Octombrie 1962. Absolvent, şef de promoţie, al Facultăţii de Fizică a Universităţii "Al.I.Cuza" - Iaşi în anul 1985. Doctor în ştiinţe fizice din 1993, specialitatea Fizică Teoretică, Universitatea "Al.I.Cuza" - Iaşi. Bursă guvernamentală MONBUSHO, pentru cercetare ştiinţifică, în perioada Octombrie 1994 - Aprilie 1996, Toyama, Japonia. Peste 60 de lucrări publicate în ţară şi străinătate în domeniul soluţiilor exacte ale Teoriei Relativităţii Generale şi Teoriei U_4 a gravitaţiei cu spin, Teorii Gauge Generalizate pe spaţii Riemann şi Riemann-Cartan şi aplicaţii speciale în teorii moderne de cuantificare. Visiting în perioada 1991-1994 la Institutul de Fizică Teoretică a Universităţii din Jena şi Institutul de Cosmologie al Universităţii Egee din Izmir.

Membru al American Mathematical Society, Tensor Society Japan, Societatea Română de Fizică şi membru fondator al Societăţii Române de Gravitaţie şi Relativitate Generală.

Conf.dr. Marina-Aura Dariescu

Născută în Iaşi la data de 23 Iunie 1962. Licenţiată în Fizică promoţia 1985 a Facultăţii de Fizică a Universităţii "Al.I.Cuza" - Iaşi, Doctor în ştiinţe fizice din 1994, specialitatea Fizică Teoretică, Universitatea "Al.I.Cuza"-Iaşi. Visiting în perioada 1991-1997 la Institutul de Fizică Teoretică al Universităţii din Zürich, Institutul de Fizică Teoretică al Universităţii din Dortmund, Institutul de Fizică Teoretică al Universităţii din Jena. Stagiu asociat în cercetări în Fizică Teoretică la Universitatea din Toyama, Japonia în perioada Mai 1995 - Martie 1996. Peste 45 de lucrări ştiinţifice de specialitate publicate în ţară şi străinătate în domeniul Teoriilor de Câmp pe spaţii S^3xR, implicaţiilor fenomenologice ale Teoriilor Gauge, fizica mezonilor B, aplicaţii şi efecte speciale în teorii modene de cuantificare.

Membră a Tensor Society Japan, Societatea Română de Fizică, membru fondator al Societăţii Române de Gravitaţie şi Relativitate Generală.

ISBN 5-7790-01-55-3